

# 物性研だより

第51巻  
第4号

2012年1月

## 目次

- 1 計算物質科学研究センターの設立について・・・川島 直輝
- 5 物性研に着任して・・・藤堂 眞治
- 7 客員所員を経験して・・・小 嗣 真人
- 10 超流動<sup>3</sup>HeのSurface Andreev bound stateとMajorana fermion  
奥田 雄一
- 13 外国人客員所員を経験して・・・R. Torsten Clay
- 研究室だより
- 15 ○ 嶽山研究室
- 24 ○ 上床研究室
- 物性研究所短期研究会
- 34 ○ エネルギー変換の物性科学
- ISSPワークショップ
- 56 ○ つくばソフトマター研究会2011
- 59 物性研究所談話会
- 60 物性研究所セミナー
- 物性研ニュース
- 67 ○ 人事異動
- 68 物性研だより第51巻目録（第1号～第4号）
- 編集後記



東京大学物性研究所

Copyright ©2009 Institute for Solid State Physics,  
The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

# 計算物質科学研究センターの設立について

計算物質科学研究センター 川島 直輝

## HPCI 戦略プログラム

2011年6月に続いて11月にも理化学研究所・富士通が開発した京コンピュータが LINPACK ベンチマークテストで 8.162 ペタフロップスを達成し、TOP500 において 1 位になりました。京コンピュータは平成 18 年度にスタートした 7 年間の文部科学省プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」において開発されたものであり、地球シミュレータが 2004 年に IBM Blue Gene に首位を明け



図1 「京コンピュータ」(理化学研究所計算科学研究機構、神戸)

渡して以来 7 年ぶりに日本製のスーパーコンピュータが世界最高性能に返り咲いたこととなります。

次世代スパコン＝京コンピュータは 2006 年に閣議決定された第 3 期科学技術基本計画において、宇宙輸送技術、高速増殖炉サイクル技術、海洋地球探査システム、X 線自由電子レーザーとともに国家基幹技術の一つとして次世代スーパーコンピューティング技術が選定されたことを受けて開発が開始されました。2007 年までの経緯については、「物性研だより」第 47 巻第 4 号(2008 年 1 月)の常次所員が書かれた記事に解説がありますのでご覧ください。その後の主な出来事を計算物性科学コミュニティの視点から列挙すると、試作・評価段階におけるベクトル演算機部分の開発からの NEC の撤退表明(2009 年 5 月)、次世代スパコンの利用プロジェクト(=HPCI 戦略プログラム)への計算物性コミュニティからの提案代表者として常行真司教授(物性研究所/理学系研究科)を選出(2009 年 7 月)、物性研究所提案に対する文科省次世代スパコン戦略委員会の評価と、それを受けて行われた分子科学・材料科学をも含む再提案、およびその採択(2009 年 10-11 月)、事業仕分けにおける次世代スパコンプロジェクト全体についての当初の否定的評価とその後の評価見直し(2009 年 12 月)、戦略プログラムフェージビリティスタディの開始(2010 年 1 月)とそれに続く戦略プログラム準備研究の開始(2010 年 4 月)、HPCI 準備段階コンソーシアム<sup>1</sup>の組織(2010 年 7 月)、京コンピュータの試験利用開始、戦略プログラムの本格実施開始、物性研究所計算物質科学研究センター設立(後述)(いずれも 2011 年 4 月)、京コンピュータの TOP500 での首位獲得(2011 年 6 月、2011 年 11 月)、実空間密度汎関数法電子状態計算プログラム(RSDFT)<sup>2</sup>の京コンピュータを利用した Gordon-Bell 賞受賞(2011 年 11 月)、といったところになるでしょうか。ごく最近も、国会版事業仕分けとしてスパコン関連のプロジェクトが再度取り上げられています。(11 月 8 日の新聞報道など。)こうしてずっと並べてみただけでも、一般の国民からも注目をされるなかで、様々な紆余曲折の上、このプロジェクトが進行してきたことが改めて認識されます。

<sup>1</sup> HPCI 準備段階コンソーシアムは、今後の計算インフラの構築を主導するための国内 13 ユーザコミュニティ機関と 25 計算資源提供機関によって形成された団体です。

<sup>2</sup> RSDFT は CMSI の重点課題を担当している東大工学系研究科押山グループを中核とするチームによって開発されたアプリケーションです。

## 並列計算の必要性和計算物質科学研究センター

このように、良くも悪くも注目されるなかで進められている戦略プログラムですが、その背景には大規模並列計算を実際に行うには従来以上に組織的な活動が必須であることが挙げられます。これは、計算機の構造が質的に変化してきていることによります。

ムーアの法則はコンピュータの性能に関する経験則として良く知られています。これはコンピュータの処理能力は5年で10倍になる(1年半で2倍)というもので、少なくとも今日までは計算機の発展をほぼ正しく「予言」しています。しかし、2000年ころまでとそれ以降とは、処理能力の増大の内訳に質的な変化があり、それ以前は、処理能力の増大に占めるクロックレートの伸びが大きかったのに対して、2000年以降は、その伸びは大幅に減速しています。(これは、身近なパソコンのクロックレートに注意していても分かることで、筆者の学生時代には、買い換えるたびに、1MHz → 10MHz → …と桁が変わっていたところが、本稿執筆に使っているPC(2010年に購入)のクロックレートは2.53 GHzであるのに対して、それ以前に使っていた2005年に購入したPCのクロックレートは1.2 GHzであり、5年間で約2倍にしかなっていません。)クロックレートは1つの計算ユニット(=コア)が1秒間に実行できる演算の回数ですが、クロックレートの伸びの鈍化を補うために、最近では1つのCPUが複数のコアを持つようになってきています。スーパーコンピュータでは以前から多くのCPUを同時に動かすことで全体としての計算スピードを稼いでいました。いずれにしても高性能の計算機を高性能に使うためには、同時に多数の計算ユニットを無駄なく動かすことが必須になっています。仮に、計算ユニット間やコア・メモリ間の通信が無限に速いとすると、並列計算はかなり楽に達成できますが、現実には空間的に分散配置されているメモリと多数のコア間の通信に必要な時間まで考慮しなければいけません。そのようなプログラミング上の問題を全てクリアしなければ、スパコンを使っても手元のpcで計算するのとあまり変わらないアウトプットしか得られない、ということになってしまいます。



図2 物性研究所計算物質科学研究センターのスタッフ

このようにユーザに対するソフト開発負担がこれからも増大すると予想されますが、個々のユーザは物性物理学研究者であってソフトウェア開発専従であることは実際上できないため、並列化プログラミングがしやすい環境の整備、並列化プログラミング技法の普及、並列化されたソフトウェアライブラリの充実、などの必要性が高まってきました。これらは全て組織的な取り組みが必要な課題です。このような背景から、京コンピュータを初めとする大型並列計算機を十分に活用することを念頭において先端的計算物質科学の研究を推進することを目的とする計算物質科学研究センター(英語略称 CCMS、以下、センター)が既存の部門・施設と並列する物性研究所内組織として2011年4月に設立されました。この組織は、みずから研究推進に関わるだけでなく、文科省 HPCI 戦略プログラムの実質的推進機関である計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の事務局機能をも受け持ち、CMSI 研究者の研究活動をサポートしています。文科省 HPCI 戦略プログラムでは、5つの戦略分野が設定されていますが、CMSI はこのうち、分野2「新物質・エネルギー創成」を担当しています。CMSI は戦略課題の推進、および次世代計算物質科学研究体制の確立のために、全国の多くの研究機関、研究者によって設立されたネットワーク型研究・教育組織で、物性研究所がその代表機関となっています。CMSI では、物質科学に特化した計算ライブラリの整備、大規模並列計算になじみのない一般の研究者に対する並列化技術などに関する各種セミナーや講習会、計算科学を活用したい実験研究者や企業研究者へのコンサルティング機能を整え、計算物質科学の発信拠点となる構想を持っています。

コア単体の性能が上がり続けていた時代であれば、プログラム自体を全く改善しなくても、ハードウェアが置き換わるたびに、同じプログラムの実行速度は少なくとも以前との比較では上がることが期待できたわけですが、2000年ころを境にして、そのような期待ができない時代になりました。これは、物性研究所スパコン共同利用の様に、自分で開発したプログラムで計算を行うユーザの割合が多い計算センターの場合には、並列化ソフトウェア開発に向けた本格的な努力が要求される時代が始まったことを意味しています。

## CMSI の特色

戦略プログラムの 5 つの戦略分野のなかでも、物性研究所計算物質科学研究センターがサポートする分野 2=CMSI の特色は物性科学・分子科学・

材料科学の 3 つの学問分野

に渡って 9 大学 2 機関が構

成機関となり、同時に多くの

計算科学研究者が個人として

も参加していることです。

CMSI には、これら 3 つの

分野の融合によって、学術

的・社会的にインパクトの高

い成果を上げることが特に期

待されています。また、その

過程で既存の枠組みを超えた

新しいコミュニティを形成できる

可能性があります。他の計算科学

分野や理研計算科学研究機構

(AICS) との情報交流による

刺激を受けて、これまでにな

い計算科学の発展を目指して

います。それを具体化するための

試みとして、並列計算を

共通言語とした若手技術交流

会を開催しています。第 1 回は

7 月 7、8 日にポートアイランド

で開催されました。第 1 日

目は CMSI で既に大規模計算

を行っている若手研究者による

「大規模計算がなぜ必要か／

どのように実行するか」の講

演が行われ、第 2 日目には新

人拠点研究員の方々による自

己紹介を兼ねた研究発表や今

後の抱負を述べる場となり、

両日とも積極的な意見交換が

行われました。その後、9 月 14

日に物性研で第 2 回が開催さ

れ、上記 Gordon-Bell 賞受賞

チームのコアとして活躍され

ている CMSI 特任講師の岩田潤

一氏による RSDFT の概要につ

いての講演なども行われまし

た。(講演時点では Gordon-Bell

賞エントリー中。)11 月 25 日

に駒場で第 3 回が行われてい

ます。いずれの会合も、異分

野のポストドク、大学院生た

ちが共通の関心をもって集



図 3 CMSI 若手技術交流会(7月7日、神戸)

新しいコミュニティを形成できる可能性があります。他の計算科学分野や理研計算科学研究機構(AICS)との情報交流による刺激を受けて、これまでにな

い計算科学の発展を目指しています。それを具体化するための試みとして、並列計算を

共通言語とした若手技術交流会を開催しています。第 1 回は 7 月 7、8 日にポートアイランドで開催されました。第 1 日

目は CMSI で既に大規模計算を行っている若手研究者による「大規模計算がなぜ必要か／どのように実行するか」の講演が行われ、第 2 日目には新人拠点研究員の方々による自己紹介を兼ねた研究発表や今後の抱負を述べる場となり、両日とも積極的な意見交換が行われました。その後、9 月 14 日に物性研で第 2 回が開催され、上記 Gordon-Bell 賞受賞チームのコアとして活躍されている CMSI 特任講師の岩田潤一氏による RSDFT の概要についての講演なども行われました。(講演時点では Gordon-Bell 賞エントリー中。)11 月 25 日に駒場で第 3 回が行われています。いずれの会合も、異分野のポストドク、大学院生たちが共通の関心をもって集う、これまでになかった情報交流の場となっており、今後、CMSI の若手ネットワークを土台にした飛躍的な分野振興が期待されます。また、これを分野 2 内にとどまらず、戦略 5 分野に拡大した 5 分野研究交流会なども神戸において開催されています。(6 月 22 日、10 月 3 日)これらの会合においては、異分野なので話が通じない、という当初懸念された事態は起きず、むしろ多くの参加者から、単一分野の研究會よりも活発な質疑応答がある、という評価を得ています。更に、CMSI では、希少元素の資源確保問題についても計算物質科学が重要な役割を演じることから、元素戦略検討 WG を立ち上げて、計算物質科学の課題について検討を始めています。

による刺激を受けて、これまでにな

い計算科学の発展を目指して

います。それを具体化するための

試みとして、並列計算を

共通言語とした若手技術交流

会を開催しています。第 1 回は

7 月 7、8 日にポートアイランド

で開催されました。第 1 日

目は CMSI で既に大規模計算

を行っている若手研究者による

「大規模計算がなぜ必要か／

どのように実行するか」の講

演が行われ、第 2 日目には新

人拠点研究員の方々による自

己紹介を兼ねた研究発表や今

後の抱負を述べる場となり、

両日とも積極的な意見交換が

行われました。その後、9 月 14

日に物性研で第 2 回が開催さ

れ、上記 Gordon-Bell 賞受賞

チームのコアとして活躍され

ている CMSI 特任講師の岩田潤

一氏による RSDFT の概要につ

いての講演なども行われまし

た。(講演時点では Gordon-Bell

賞エントリー中。)11 月 25 日

に駒場で第 3 回が行われてい

ます。いずれの会合も、異分

野のポストドク、大学院生た

ちが共通の関心をもって集

う、これまでになかった情報

交流の場となっており、今後、

CMSI の若手ネットワークを

土台にした飛躍的な分野振興



図 4 CMSI 広報誌「Torrent」

## 計算物質科学研究センターと神戸分室

センターとしては、CMSI の機能のなかでも、特に、物性物理学分野における先端的アルゴリズムの開発とそれを利用

した物性科学研究、物性研スパコンなどの京コンピュータ以外の計算資源の CMSI 研究者による利用のサポート、大規

模並列ソフトウェア・アルゴリズムの開発とその普及、さらにそれらを通じた、次世代の計算科学の担い手となる人材の

育成を主なミッションとしています。本稿執筆時点において、計算物質科学研究センターの人員は、常行真司センター長

以下、教員(特任教授、教授、准教授、助教)11 名(兼任含む)、特任研究員 7 名、学術支援専門員 4 名、事務補佐員 4 名

の計 26 名となっています。(さらに、現在特任研究員 2 名を公募中です。)センター主催による会合としては、記念すべき第 1 回シンポジウムを物性研究所大講義室において 9 月 12 日(月)、13 日(火)の 2 日間の日程で開催しました。特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(共用法)に基づく J-PARC、SPring-8、京コンピュータの 3 つの大型プロジェクトの連携を意識したこの研究会においては、家所長、文科省情報課計算科学技術推進室の林孝浩室長、北陸先端大学寺倉清之教授の挨拶、常行統括責任者によるセンター概要の説明に続いて、J-PARC センターの新井正敏氏、SPring-8 XFEL の城地保昌氏による講演が行われました。また、センターでは、CMSI 広報活動をも積極的に展開しています。機関誌「Torrent」をこれまでに 3 号発行しており、特に若手研究者の最近の研究活動にスポットをあてた情報公開を行っています。Torrent では、計算物質科学の未来像に関する若手座談会(Vol.1)、2011 年 1 月の CMSI 研究会(物性研)におけるポスター賞受賞者による並列計算の紹介や、2 月の CMSI 産官学連携シンポジウム(本郷)における招待講演(橋本和仁教授(東大工・先端科学技術研究センター)、M. L. Klein 教授(テンプレ大))の紹介記事(Vol. 2)、若手技術交流会の紹介、岩田潤一氏による RSDFT の紹介(Vol.3)などがされています。(Torrent No. 1-3 は CMSI ホームページ <http://www.cms-initiative.jp/> からダウンロード可能です。)

センターの設立と同時に、神戸にセンターの分室も設置されました。これは、「京」の設置場所である理化学研究所計算科学研究機構(AICS)ビル内に、京の試験利用や計算機科学分野を含む異分野との交流の拠点を確保するためのものであり、2012 年 11 月の京の本格利用開始に向けて、現在準備を整えています。2011 年 4 月から 2012 年 10 月までは、京コンピュータの試験利用期間と位置付けられています。この期間は、特に高いスパコン利用技術を有するユーザだけが開発中のシステムの一部を利用することが認められ、本格利用開始直後からシステムの有効利用を図ることができるよう、大規模並列計算用の種々のプログラムの開発やチューニングにあたっています。これらのミッションを果たすため、センターでは分室にスタッフを常駐させて、プロジェクト全体の円滑な推進を図っています。これは、AICS 所属のソフトウェアチューニング部門スタッフや富士通 SE と頻繁に打ち合わせを行って高度なソフトウェア開発を自ら行うだけでなく、他の CMSI 研究者に対して的確



図 5 センター神戸分室

に情報を展開する重責ですが、2011 年 4 月から 10 月までの約半年間は渡邊宙志助教がこれを務めました。これらの業務を強化し、異分野との交流をさらに進めるために、藤堂眞治氏が物性研究所特任教授として 10 月 25 日に着任しました。計算物性物理学分野の研究者のなかでもアルゴリズム論・並列計算手法に特に明るい藤堂特任教授には、戦略プロジェクト全体のコアといえる部分で存分に力を発揮されることが期待されています。

## 終わりに

計算科学は比較的新しい分野ですが、学問的・社会的にインパクトある成果が出せるか、今後数年間のセンターおよび CMSI の活動に大きな関心が集まっています。1995 年以来スパコンの全国共同利用を展開してきた物性研究所として、この期待に答えられるよう、計算物性物理関係者を中心として最大限の努力をしているところです。

# 物性研に着任して

計算物質科学研究センター 藤堂 眞治

2011年6月と11月の二期連続でTOP500の第一位を獲得した「京コンピュータ」は、神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構に設置されています。2012年秋の共用開始にむけて、さらなる開発・整備が進められています。この計算科学研究機構の中に物性研究所の分室があることをご存知でしょうか？2011年4月に物性研に設立された計算物質科学研究センターの神戸分室です。

私は、2011年10月25日付けで、この計算物質科学研究センター神戸分室に特任教授として着任いたしました。物性研究所で辞令をいただくのは、実はこれで3度目となります。初回は、本郷の理学系研究科で学位を取得後、1996年4月にCOE 研究員として当時の高山一先生の研究室に着任した際、1996年9月には物質設計評価施設電子計算機室の助手として2度目の辞令をいただきました。電子計算機室では、物性研共同利用スーパーコンピュータの管理・運営などに携わると同時に、並列計算機を用いた大規模シミュレーションアルゴリズムの研究を始めました。その後、2000年4月の物性研柏移転、スーパーコンピュータとネットワークの更新を何とか無事乗り切り、その年の12月に柏を離れました。スイス連邦工科大学(ETH)、東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻を経て、再び物性研でお世話になることになりました。あらためてよろしくお願いたします。

私は、これまで主に量子モンテカルロ法などの計算物理学の手法を用いて、量子スピン系などに見られる新奇な秩序状態と量子相転移現象の研究を行ってきました。量子ゆらぎの効果は、細い棒状や薄い膜状の磁性体、ナノ微粒子などにおいて特に顕著です。そこでは、物質の形状効果が特に強く、量子ゆらぎによりスピン同士が共鳴し、互いに揃うことのできない状態が実現します。この「スピン液体」は、非磁性不純物を混ぜると、逆に長距離磁気秩序が出現するなど、通常の磁性体とは極めて異なった特性を示します。このような、量子ゆらぎと乱れの複雑な競合・共存により生じる物性現象の本質を理解するには、コンピュータシミュレーションが重要な役割を果たします。また、スピン液体においては従来の秩序変数では記述できないトポロジカルな秩序が実現することも知られています。近年、エンタングルメントエントロピー、 $Z_2$  ベリー位相といった量子状態を特徴付ける量が提案されていますが、量子モンテカルロ法を用いてそれらを如何にして測定するかについても研究を進めています。さらには、スピン・パイエルス系などスピンと他の自由度が結合した系、磁気双極子相互作用が支配的な磁性体などについても興味を持って調べています。

これ以外にも、量子磁性体、電子系などのいわゆる量子格子モデルでは、格子構造(原子の幾何学的配置)、相互作用の強さや到達距離、またその異方性の強さなどによりさまざまな新物性・新機能が期待されます。実験的にも近年さまざまな物質が合成されるようになってきました。複雑な量子格子モデルに対する大規模な計算機シミュレーションを実現するため、ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulation)プロジェクトを推進しています(<http://alps.comp-phys.org>)。このプロジェクトでは、オープンソースのC++ライブラリを開発しています。量子モンテカルロ法だけでなく、厳密対角化や密度行列繰り込み群、動的平均場近似といったアルゴリズムを用いたシミュレーションも可能となっています。理論家だけではなく、実験家の皆さまにも広く使っていただけるよう、今後も開発・普及に力を尽くしたいと思います。試してみたいと思われる方は、ぜひお気軽にご相談ください。

計算物質科学研究センター神戸分室において私に課せられた役割の一つは、「京」を使った大規模シミュレーションを進めていくことです。それに加え、文部科学省「HPCI 戦略プログラム」(旧「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」)を推進する研究ネットワーク、「計算物質科学イニシアティブ」(CMSI: Computational Materials Science Initiative)の一員として、これから「京」を活用していく物性物理・分子科学・材料科学分野の研究者に対する、大規模並列化プログラミングや新しい数値計算アルゴリズムに関する情報共有、分野間あるいは計算機科学者などとの情報交換の場の提供を通じて、「計算物質科学」という新しい分野を大きく育て上げていくことももう一つの大きな使命です。

物性物理、特に計算物性物理は本来、現象から「有効模型」の抽出→様々なアイデアにもとづいたアルゴリズムの開発→プログラミング→シミュレーションの実行→結果の解析から「有効模型」へのフィードバック、という一連のサイクルを個人あるいはごく少数で行う、いわゆる「スモールサイエンス」的な要素が強い学問であると思います。しかしながら、その一方で、「京」のような超巨大なスーパーコンピュータを構築し、それを使って計算科学を大規模に進めていくという「ビッグサイエンス」においては、ソフトウェア開発においても個人を越えて組織的に進めることが不可欠となってきました。この「矛盾」を乗り越え、「スモールサイエンス」の長所を生かしつつ、最先端のスーパーコンピュータの性能を十分に享受することのできる「最適解」を見出せるよう、今後微力ながら力を尽していきたいと思っております。

# 客員所員を経験して

(財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 小嗣 真人

2010 年度前期に、辛先生にホストになっていただき、客員准教授として 4 回ほど物性研に滞在させていただきました。物性研と私のなれそめは学生時代にさかのぼり、田無に SOR-RING があったころに端を発します。大阪大学の基礎工学研究科の菅研究室の学生であった私は、当時助教授であった大門先生の二次元表示型球面鏡分析器が設置されたビームラインで研究をさせて頂いておりました。その際、田無のプレハブに滞在させていただいた時が発端となります。その時のホストが今回と同じく辛先生だったということで他ならぬ縁を感じております。

普段の私は SPring-8 に籠もって研究を行っているのですが、野生の鹿やイノシシが出没する播磨の山奥を下りて、若い学生さんの活気に溢れた柏キャンパスにお邪魔すると、やはり新鮮な気持ちになり、おかげさまで物性研での滞在をエンジョイすることができました。私の滞在を暖かく迎えて頂いた辛先生をはじめ、いろいろとお手数をおかけした研究員の谷内さん、小谷さん、学生の阿部さん、秘書の新榮さんに厚く御礼申し上げます。今回の滞在は半年だったということでもまだ途中の部分ではありますが、中間報告として簡単にまとめさせて頂きました。

そもそも、私に与えられた今回の物性研でのミッションは、辛研究室に新しく納入された収差補正型光電子顕微鏡装置の建設と利用研究を後押しすることでした。光電子顕微鏡(PEEM)は表面の形状に加えて、化学組成や電子状態、また磁区構造を数十 nm の空間分解能で直接可視化ができるのが大きな特徴です。また最近では放射光のパルスと同期させた時間分解測定が盛んに行われており、nsec オーダーのスピンダイナミクスの研究も精力的に行われております。この PEEM との出会いは、独マックスプランク研究所のポストドク時代からで、PEEM データの持つビジュアルの説得力の強さに大きく感銘を受けたのがきっかけの一つでした。現在は SPring-8 の BL17SU にて光電子顕微鏡を用いた研究を推進しており、空間分解能としては世界最高水準を実現することができ、利用研究としてはナノ磁性を中心に、グラフェンの電子物性や、はやぶさサンプルに代表される地球惑星科学の分野まで、分野横断的な展開を進めております。装置に触るのが大好きな私にとって、今回のお話はまさに好機到来で、最新の装置の新機能を楽しんで体感することができました。SPring-8 やマックスプランクで培った経験が、今回の光電子顕微鏡の導入へのお役に立っていただければと願っております。

一点だけ手痛かったのは 3 月 11 日に発生した東日本大震災の影響でした。幸い装置の倒壊や破損といった物理的なダメージはありませんでしたが、4 月の着任当初より計画停電にみまわれ、実験ができるのかどうかも分からない状態でした。任期が半年であったので、この遅れは痛い損失でありました。装置以外では温調の停止など小さな制限もありました。小さな障害であっても精密計測機器にとっては分解能に大きな影響を及ぼすため決して無視はできません。谷内さん、小谷さん、阿部さんと毎日のように連絡を取りながらサポートを続けておりました。お盆を過ぎるまでこのような電力事情に悩まされましたが、現在は電力状態も回復し無事に作業を行うことができています。

さて、物性研に導入された新しい PEEM は、収差補正をするための反射鏡を装備しており、高い空間分解能と高い検出効率が期待されています。空間分解能は分析科学と物質研究の両面において最大の関心事の一つと思われます。原理的には電子線の回折限界が空間分解能の律則となっていますが、現実的には電子レンズの収差、つまり球面収差とエネルギー収差が律則条件となっており、いかに収差を補正するかが重要な課題となっています。特に PEEM においては、信号の大半が二次電子であることから数 eV にわたる広いエネルギー収差を補正する必要があります。また球面収差に関してはこれまで取り込み立体角を制限することにより収差を抑えてきましたが、信号強度が立体角に反比例して減少するため、必ずしも最良の策とは言えませんでした。

これらの収差を補正するための反射鏡の開発がドイツやアメリカを中心に進められています。Fink らの開発する 4 極電子反射鏡においては、色収差と球面収差の両方を補正することができ、理論上は 0.5nm の空間分解能が期待されています。これに加えて、取り込み立体角を大きくとれることから 100 倍の透過効率向上が期待されています。これは、高圧

の逆バイアスを印加することで、光電子を反射させ、収差補正を行うものであります。特に電子レンズは収差がなかなかとれないため、このような反射鏡の導入は非常に画期的であります。

現在はこの収差補正機能を用いて分解能の評価を行っております。電源のトラブルや絶縁碍子のリーク電流などの諸問題に見舞われ、現在でもまだ完全に解決はしておりませんが、現状では 5nm を切る空間分解能が実際に得られております。SPring-8 の PEEM の空間分解能が、LEEM モードで 8nm、PEEM モードで 22nm だったことを考えると、これは大きな前進になるかと考えています。もちろん電源システムのバグ出しや、環境の整備(振動、磁場)を適切に行ってより精密な測定を行うことができれば、最高の空間分解能に到達する日もそう遠くないと考えています。

さて、このような分解能の追求は非常に重要ですが、その一方で測定対象の選定もそれ以上に重要であります。特に高分解能の装置の特性を活かした実験を考えることは非常に重要です。また辛研究室には様々なレーザー光源があり、これらを有効活用した研究が展開できれば、なお良いと考えております。

これまで私が進めてきた研究に、隕石に由来する L1<sub>0</sub> 型 FeNi 規則合金の磁性研究があります。L1<sub>0</sub>-FeNi は天然では鉄隕石だけに含まれる希少な磁性体で、人工の FeNi 合金と比較して飛躍的に高い磁気異方性や保磁力を示すのが大きな特徴です。最近のレアメタル価格の高騰を背景に、脱希少金属へのニーズは年々高まっております。その一方で L1<sub>0</sub>-FeNi は資源が潤沢な Fe と Ni で構成されており、環境面と経済面で高い波及効果が期待されていることから、レアメタルフリーの高磁気異方性材料として人工創成の試みが進められています。つまり、この「宇宙からの贈り物」を我々物性研究者がどのように活用するかが問われているのです。

L1<sub>0</sub>-FeNi は c 軸方向に Fe と Ni が交互に積層された fct 型の超格子構造として記述されますが、構造の変化に伴って磁気異方性が劇的に向上します。しかし、その起源はほとんど明らかになっていません。特に磁気メモリとして利用するためには  $1 \times 10^7 \text{erg/cc}$  の磁気異方性が要求されますが、構造と磁気異方性の電子状態の相関は明らかになっていません。特に、Fe は fcc 構造で反強磁性となることから、薄膜のオーバーラップが磁気異方性を下げる一つの要因として問題視されます。またステップ近傍では anti-phase となり超格子構造がくずれるため、これもまた磁気異方性を下げる要因となります。これらの問題を解決するためには、蒸着中における薄膜成長の動的過程を直接観察するとともに、ステップテラス構造と磁区構造の相関を直接的に調査することが求められます。そのための有効なプローブとして PEEM は非常に有用と考えられます。現在はそのための準備測定を進めており、基板の清浄化や蒸着源の調整を進めているところです。この薄膜成長メカニズムの解明ができれば、L1<sub>0</sub>-FeNi の実現に道が開かれ、高効率スピン源として応用への展開が期待されます。さらにこの先にはナノ磁性と惑星科学がリンクした新しい物性研究への発展を進めたいところです。

さて、私の在籍している SPring-8 にはちょうど東大物性研が建設した軟 X 線ビームライン BL07LSU が本格稼働を始めており、今回の客員は両者の連携を考える上で非常に有意義な機会となりました。放射光物性の現在のトレンドは自由電子レーザー(SACLA)や SPring-8II など放射光パルスの短時間化に向かっており、放射光バンチの時間構造を有効活用した時間分解測定に今後シフトしていくことと思われれます。現在の SPring-8 ではせいぜい 100psec の時間分解測定に限られていますが、SACLA では 1psec まで、さらに SPring-8II ではサブピコ秒のオーダーまでの短パルス化が計画されています。さらに SPring-8II では不均一系・多様系の物理への挑戦を一つのキーワードに掲げています。これまでは試料の平均構造を見ていたに過ぎなかったのですが、例えばナノ分子をそのまま単分子計測することをひとつの目標としています。となると、時間分解と空間分解の究極を目指すということになり、小さなものの速い反応を観ることがホットトピックになると考えられます。もともと PEEM は時間分解測定に適した測定装置で、スピン反転のダイナミクスや、有機分子の薄膜成長ダイナミクスに代表されるように、時間分解と空間分解測定を両立して実施するのに最適です。ですから今回物性研で培った技術が、将来的に両者を強く連携させて新しい研究に繋がればと妄想しているところです。

それから、物性研に籍を置かせて頂いて思わぬ副産物もありました。一つは論文へのアクセスのしやすさです。特に SPring-8 は図書館が貧弱で満足に論文を引くことすらできずいつも悩みの種でした。東大の図書館のアカウントを作って頂いてからは、引けない論文がないくらい非常に膨大な蔵書の中から、自分の必要な論文をいつでも引き出せるのでおおいに活用させていただきました。知的な欲求を十分満たしていただいたとともに、アカデミズムとは本来こうあるべきだと痛感した次第です。

柏での滞在生活は時間的には短いものでしたが、TX の駅やららぼーとも出来、昔に比べるとずいぶん開けたという印象があります。谷内さん小谷さん阿部さんにはいろいろなレストランに連れて行っていただき、柏の食事情にも少しだけ

詳しくなることができました。私は年のせいか食も細くなりあっさり系にシフトしつつあるのですが、濃い味が好みの若い彼らにとってはレストランを選ぶのに苦勞したかと思います。またゲストハウスは非常に綺麗で快適に過ごさせて頂きました。最近部屋が混んでおりなかなか予約がとれなかったのですが、その際は駅の近くの某ホテルに滞在しました。ホテルの入り口が分からず深夜に小一時間ほどあたり彷徨ったこともありましたが、早めの予約が重要ということ学びました。ゲストハウスが混み合っているのは共同利用が進んでいることの裏返しということで前向きに捉えたいと思っています。

最後になりましたが、今回の滞在では新しい装置の立ち上げはもちろんのこと若い学生さんスタッフの皆さんとの交流や、活気あるキャンパスの雰囲気を体感し、アカデミアのいいところを数多く経験させていただきました。これはSPring-8では経験できない大変フレッシュな体験でありました。この機会を与えていただいた辛先生に厚く御礼を申し上げます。以上、とりとめのない話を続けてしまいましたが、今後の皆様のご研究と物性研の発展を祈りつつ一旦筆を置かせて頂きます。

# 超流動 $^3\text{He}$ の Surface Andreev bound state と Majorana fermion

## 物性研客員からの話題提供

東京工業大学大学院 理工学研究科 物性物理学専攻 奥田 雄一

Majorana fermion というのは、イタリアの理論家エttore・マヨラナによって理論的に予言されたフェルミ粒子で、反粒子と粒子の区別のつかない特殊な粒子である[1]。素粒子の世界ではニュートリノが Majorana かも知れないと議論があるが、未だに確認はされていない。このユニークなフェルミ粒子が、Condensed matter のエッジステートに実現しているかもしれないという理論が提案されて、ホットな話題になっている[2]。

超流動ヘリウム 3 の B-相は、スピン三重項 p-wave 超流動の BW 状態であることが確立している。BW 状態は P 波超流動としては異色で、ギャップは等方的に開いており、time reversal invariance も破られていない。バルク状態でギャップが開いている P 波超流体は界面にギャップレス・モードが存在する。 $^3\text{He-B}$  は、最近話題の topological superfluid の好例とされている。このギャップレス・モードの存在する状態は、Surface Andreev bound state と呼ばれる異方的超流動特有の準粒子状態である[3]。

我々は超流動ヘリウム 3 の表面状態に関心をもって研究を続けてきたが、横波音響モードを詳細に調べることで、Surface Andreev bound state の存在を明らかにすることができた。さらに、準粒子の表面散乱条件を向上させることで specular limit を予測する漸近的振る舞いを確認することができ、Majorana fermion についての議論をすることができた。この小論ではその話題を紹介したいと思う[4]。

等方的な超流動ヘリウム 3-B も、壁が存在するとオーダーパラメータは壁に平行な成分  $\Delta_0$  と壁に垂直な成分  $\Delta_1$  に分裂する。壁に垂直な成分は、その奇関数的な性質に関係した破壊的干渉効果によりコヒーレンス長のオーダーで抑制される。一方、平行成分はほとんど影響を受けない。壁直上では、垂直成分は完全にゼロになっている。ここでは超流動相は A-相と酷似している Planar 相というものになっている。

$^3\text{He-B}$  では、このような状況下で壁近傍に局在した準粒子状態(Surface Andreev bound state)が形成されるのである。この状態のエネルギーは、準粒子の入射角を  $\theta$  とすると  $\pm\Delta_0\sin\theta=(\Delta/k_F)k_{\parallel}$  と表される。粒子・空孔対称性があるため、解はいつも土のセットで出てくる。これを 3 次元的に表わすとコーン状になるので Dirac cone と呼ばれる。Majorana 粒子の場合は反粒子と粒子の区別がないため negative solution は意味を持たないので、上半分だけの cone になる。これを Majorana cone と呼ぶ。

この表面束縛状態のエネルギーが  $k$  に比例する準粒子が Majorana fermion の性質を持つことを考えよう。バルクの超流動状態を Cooper 対の集合と考えた場合、Cooper 対の数は不定であることに注意し、かつ Cooper 対のスピン自由度を無視すると、巨視的な数の Cooper 対の中で粒子を 1 ケ生成する場合と空孔を 1 ケ生成する場合と巨視的な状態に違いはない。これらの粒子の生成や消滅は表面束縛状態を通して起こると考えると、表面束縛状態は Majorana の性質(粒子の生成と反粒子の生成との区別はつかない)が出てくる。問題はスピンの自由度のことであるが、 $^3\text{He-B}$  の表面では p-wave pairing の特徴として  $|\uparrow\uparrow\rangle$  という equal spin state が必ず存在する。この状態が少しでも存在するとスピン自由度を識別することができなくなる。このように  $^3\text{He-B}$  の Surface Andreev bound state の準粒子は Majorana fermion になっていると理解出来る。

さて、実験の話へ移ろう。表面束縛状態をどのように観測するかというのは大きな問題である。そもそも表面束縛状態の研究は、異方的超伝導の超伝導状態の対称性を確認するために考えられた。表面束縛状態はトンネル分光に特徴的な形を与えるので、その形から超伝導状態の同定が可能になる。このように、超伝導ではトンネル分光という強力な手法があり、この方法で  $d$  波状態や  $p$  波状態が確認されている。一方、荷電中性の超流動では観測手段が見当たらない。長らく実験にかからなかった理由はここにある。しかし、横波音響インピーダンスが有効であることが偶然発見された。ナイーブに考えると超流動体中で壁を横波方向に振動させたところで反応があるとは期待できない。しかし、不純物や壁によって対破壊が容易に起こりえる  $p$  波超流動は別であった。対破壊により生成された準粒子と壁との間で横方向の運動のやり取りを行うことが出来るのである。この方法により分光学的に表面束縛状態を観測することが出来ることが分かった。

図 1 は Surface Andreev bound state の状態密度である。図中でパラメータ  $S$  は、鏡面度を表わす量で  $S=1$  が完全に鏡面的 (specular)、 $S=0$  が完全に拡散的 (diffusive) 散乱を示している。 $\Delta$  はバルクの等方的に開いたギャップである。ギャップ内にゼロエネルギーから連続的に状態が分布していることが分かる。この様子は  $S$  の値によって大きく変わる。通常の壁の場合、表面の粗さは  $k_F$  で動き回っている  $^3\text{He}$  準粒子の波長に比べると十分粗く diffusive である。diffusive 表面では、状態密度はゼロエネルギーからエネルギーに依らずほぼ一定の値を示し、 $\Delta^*$  のところで急激にゼロになる。 $\Delta^*$  とは図中に矢印で示した特徴的なエネルギーで、 $\Delta$  との間にギャップが開いている。これが  $S=1$  の specular な壁になるとサブギャップはなくなり、ギャップレスになっている。さらに状態密度がエネルギーに対して線形に変化している。これは、specular な極限では表面束縛状態のエネルギーが波数に比例していることの表れである。

横波音響インピーダンスは、AC カットされた石英を用いる。その共鳴条件 (共鳴振動数、 $Q$  値) から複素インピーダンスを求めることができる。

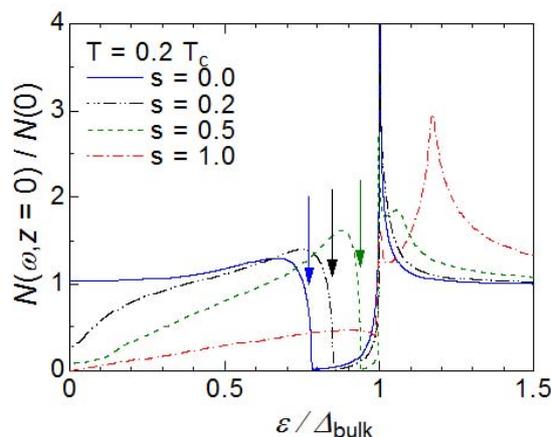


図 1. 超流動  $^3\text{He-B}$  の表面束縛状態の状態密度。矢印のところが  $\Delta^*$  である。

実験結果の詳細は割愛するが、インピーダンスの解析から、明らかにギャップ内に低エネルギー状態が存在すること、特に状態密度の  $\Delta^*$  に対応するエネルギーでキックが見出され、まぎれもなく図 1 の状態が実現していることが確認された。

さらに、 $^3\text{He}$  の実験の特徴として specularity parameter  $S$  を実験的に変化させることが可能である。 $^4\text{He}$  を正確に制御した分量を導入すると、 $^4\text{He}$  は壁表面に選択的に吸着され、かつその吸着膜の厚さをコントロールできる。この  $^4\text{He}$  薄膜は十分低温で超流動転移 (KT 転移) を示して、 $^3\text{He}$  準粒子の散乱の条件を diffusive から specular へと連続的に変化させることが可能となる。実際、 $S$  を 0.8 ぐらいまで上げることができた ( $S=1$  ではインピーダンスはゼロになって測定不可になる)。その実験で、予想もしていないことが起こった。

図 2 に  $S$  を変化させた時のインピーダンスを  $S$  による値の減少分をスケールしてプロットしている。 $S$  が 0.5 以上になると、 $\Delta$  あるいはそれより少し低いエネルギーのところに新たなピークが出現してきた。図の矢印で示しているところである。この新たなピークは、広島大学の理論グループの助けを得て、表面束縛状態に熱励起された準粒子が壁の運動に寄与していることが明らかになった。さらに重要なことは、specularity を上げるに従って状態密度の形が変わっていくが、その様子がこの熱励起された準粒子による寄与に反映されており、表面状態を specular にするに従って、理論通りエネルギー分散式が、波数  $k$  に比例するようになっていくという予想が確認された。すなわち  $S=1$  の極限では、Majorana cone ができていることを示すことができた。また、 $S=0.5$  というところでも、すでに十分 Majorana cone が発達していることも示されている。このように音響インピーダンスという極めて古典的な手法で Majorana cone が確認されたことは大変興味深い。

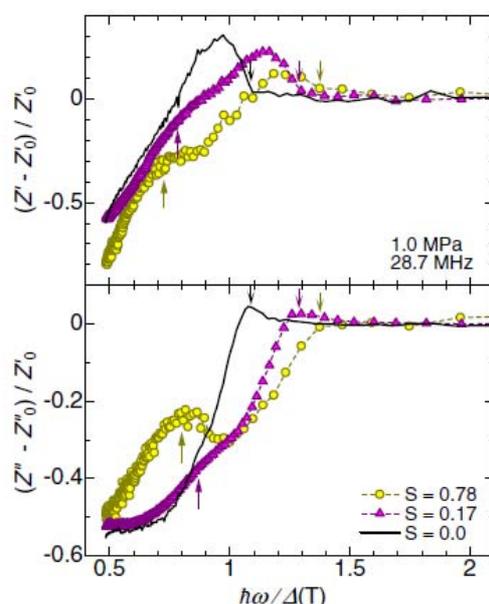


図 2 鏡面度  $S$  をパラメータにした横波音響インピーダンスの結果

音響インピーダンスによって表面束縛状態が明らかにされ、スペキュラーな極限で Majorana cone ができていることが示されたが、Majorana cone が形成されていると、その磁氣的性質に特異な異方性が出てくるという予測がある。早急に磁気状態の研究に着手したいと考えている。

本研究の特に強磁場下での実験では、東大物性研の超低温施設の一部を使用させていただいた。この場をお借りして御礼申し上げます。また、東工大物理の G-COE、新学術領域研究、科研費などの助成を受けて研究が推進されたことに謝意を表します。

#### 参考文献

- [1] E. Majorana, Nuovo Cimento 5 (1937) 171.
- [2] 佐藤昌利、物性研究 93, (2010) 311.
- [3] K. Nagai et al., J. Phys. Soc. Jpn, 77 (2008) 111003.
- [4] Murakawa S, Wada Y, Tamura Y, Wasai M, Saitoh M, Aoki Y, Nomura R, Okuda Y, Nagato Y, Yamamoto M, Higashitani S and Nagai K J. Phys. Soc. Jpn, 80 (2011) 013602.

# 外国人客員所員を経験して

## **My experience as a visiting professor at ISSP**

**R. Torsten Clay**

**Associate Professor**

**Department of Physics & Astronomy**

**Mississippi State University**

**Mississippi State, MS 39762-5167**

**r.t.clay@msstate.edu**

I visited ISSP for 4 months from August through December, 2011, while on sabbatical leave from Mississippi State University, USA, where I am an associate professor. My host at ISSP was Mori-sensei. I am a theorist and computational physicist who works on strongly correlated electron materials, especially the organic superconductors. The majority of the experimental research on these materials is currently being done in Japan. It was exciting and very useful to my research to talk to Mori-sensei and other Japanese researchers at the ISSP and elsewhere in Japan. As I am preparing to leave Japan, 4 months now seems like a very short visit. But the visit has given me many new ideas for future research work, and I hope I can continue collaboration with Mori-sensei and others in the future.

My personal situation is somewhat different from most foreign ISSP visiting professors as my wife is Japanese and I visit Japan regularly (about once per year). But this is the first time I have lived in Japan for an extended time period. The climate in Mississippi is similar to that in the Tokyo area: Mississippi also has a very hot and humid summer and rarely any snow during the winter. This is the first place I have experienced earthquakes on a regular basis however.

We have two daughters, ages 3 and 7. Although they both speak Japanese, we were worried how they would adjust to life here. This was particularly for our older daughter, who started 1st grade here at Toyofuta Elementary School in September. We were worried she would have trouble joining 1st grade because all of her classmates had started 1st grade in the spring.

It was interesting for me to compare differences in Japanese and American elementary schools. On the first day of school there was an assembly where all of the new students were asked to introduce themselves at a microphone in front of the rest of the school (several hundred students!). This is not done in American schools and was very scary for her. However, she quickly made friends at school and greatly enjoyed it. It was very nice that many other students at Toyofuta also lived in our apartment building, including another family who was also visiting from the USA. They all walked to school together and often played together after school. My younger daughter also liked the day-care she went to a few times per week.

During my stay I attended Japanese classes at the University of Tokyo Graduate School of Frontier Sciences. I found these very useful and definitely recommend them to other foreign visiting professors. Learning to read Hiragana/Katakana was very helpful for everyday life in Japan. I am quite behind my daughter's Japanese study at school in the 1st grade however. But now I notice that I can understand some of the buttons on my ISSP telephone which were a mystery when I first arrived (スピーカ)! I would like to thank the Japanese language class teachers Yataka-sensei, Noda-sensei, and Ohsumi-sensei. I will try to continue learning Japanese in the future.

I would like to thank many people for helping us during our stay. First, Mori-sensei for inviting me to apply for the ISSP visiting program. Kameda-san and Kubo-san in the ISSP International Liaison office helped us a lot with all the required applications, getting a bank account, etc. The ISSP International office also did a great job providing little things that made it easier to move here: bicycles, essential kitchen appliances, etc. The staff at Toyofuta School was very helpful, especially our daughter's teacher, Suzuki-sensei. And finally many other residents of Kashiwanoha Lodge helped us throughout our stay.

## 研究室だより

# 嶽山研究室

国際超強磁場科学研究施設 嶽山 正二郎

### 1. はじめに

この数年、共同利用係から研究室だよりの原稿を依頼され続け、その都度、何かの言い訳を言っでは逃げてきました。今年はどうとう逃げ切れなくなりました。共同利用係山田係長の押しも一入強く、とうとう観念して執筆依頼を受けることになってしまいました。赴任後 5 年を過ぎた研究室には「研究室だより」を書くことになっているそうです。私が物性研に赴任したのは 2003 年ですから、すでに、9 年が過ぎようとしています。言い訳に過ぎませんが、赴任以来これまで異常な事態の連続に翻弄され続け、とてもまともな研究室だよりが書けそうになかったからでもあります。

### 2. 物性研へ赴任

私は、1983 年 10 月六本木物性研の超強磁場部門三浦研究室助手として採用されました。その頃、ちょうど C 棟が完成したばかりでしたので、ロングパルス磁場から一卷きコイル法超強磁場など磁場発生技術開発から様々な物性計測の開発と立ち上げを行って来ました。あっという間に 5 年たち、当時紳士協定でありました助手任期切れで職探に突入しました。なんとか、1991 年の春に、新設された姫路工業大学理学部、光物性研究室の助教授として採用してもらいました。このとき、超強磁場とは一生縁を切ろうと決意し、その後 1999 年に千葉大理学部にて教授で赴任してからも、もっぱら結晶育成と光物性の両輪を特徴とした研究室を作り上げて来ました。特に、千葉大では、研究室の立ち上げだけでなく建物などのインフラ事業にも大きく関わり、最後の仕上げに翻弄している矢先に、気がついたら、柏の物性研強磁場研究室を引き継ぐことになってしまったのでした。気ままに自分の人生を自力で決めてきた私のこれまでの人生の歩み方としては随分と異なる選択でした。当時の物性研をはじめとして日本のパルス強磁場業界の状況を鑑みますに、当時の私の判断しだいでは、現在の状況とはずいぶん異なった様相になったと思われまふ。それ故に、当時は、国内外からの強い精神的な圧力に負けて(強磁場界の某大物教授がわざわざ御夫婦で海外から私の自宅まで説得に押しかける始末です)、物性研赴任を決意したと言っても過言ではありません。50 才にして始めて自分の意に反した人生の選択をしてしまいました。

かようなスタートですので、2003 年春に物性研に赴任はしましたが、千葉大での学生実験、講義や卒論、修士の学生の研究継続のための面倒を見なければならず、最初の年度は、どちらに雇用されているか分からない状態でした。もちろん給料は東大からのみ頂いておりましたが、研究テーマが全く異なってしまうので、研究室の助手さんはじめ院生のほとんどは、嶽山先生だけ物性研に行って自分たちはこのまま先生の指導の下で始めた研究を継続したいと主張します。しかたがありません。実験装置のほとんどは千葉大に残し、自分の体一つと教室の中の本などの紙ものだけの引っ越しとなりました。このよう状況でしたので、私の物性研転勤が家族に知られたのは 1 年もたってからです。

物性研強磁場を引き継ぐ所員の任務は自明でありました。それまで世界の強磁場を牽引してきた国内の大物教授さん達が相次ぎ退職され、その後に残された国内の主立った若手の優秀な研究者との間には 20 歳ものギャップがあったわけです。まず日本国内の主要なパルス強磁場拠点をどうするのか？また、物性研強磁場自体も、三浦所員退職に続いて後藤所員も退職されることから、将来の物性研強磁場をどのようにするのが緊急の課題であり、重要な決断を必要とする様々な難題が否応なしに私に迫ってまいりました。また、これすなわち、日本の全体の主要な強磁場施設に大きな影響を与えることになり、大変な重責を負うはめになってしまいました。私自身、それまでの 10 年間強磁場業界から離れていたこともあり、状況認識がなく、大変困難な決断と実行を迫られることになりました。三浦所員の退官行事に次ぎ、後藤所員の退職の行事、また、その後の人事と息つく暇もなかったわけです。この件に関しましてはたいそう働くことになりましたが、「研究室だより」という内容からは逸脱しますとの省かせて頂きます。

### 3. 強磁場実験室の再立ち上げ

さて、このような状況でも、自分の研究室、それから物性研強磁場をどのような方向に持って行くかが、最重要課題でした。とにかく、この任務を引き受けた以上は世界でも物性研にしかない電磁濃縮超強磁場は守り発展させることが、私のこのポストの使命と考えました。これは1980年直前に近角聡信教授が打ち立て、三浦、後藤研究室によって長年進められてきた伝統的な超強磁場プロジェクトであります。1980年頃から六本木物性研C棟に設置された超強磁場発生装置は、1999年柏移転に伴い、新C棟は2300m<sup>2</sup>と拡張され、副バンクを除いてほとんどの強磁場発生用電源装置が基本設計図はほぼそのまま踏襲された状態で刷新されていました。しかしながら、新設の電源装置だけでなく新C棟も補正予算で慌ただしく建設されたためか外目は立派でも隠れたところでの不具合は想像を絶するほどでした。

赴任早々、広大な実験室床のコンクリート施工に問題があり粉塵が発生するとのことで、実験室床の全面塗り変え直しから始まりました。既に装置が配置してある状況なので、装置に繋がれたケーブルなどを全て外し、部屋の半分に移動し、再び移動しなおして残りの半分を施工するといった具合です。引っ越しの場合は一度で済みますが、この場合2度移動しなければなりません。当時は、院生はおろか助手もまだいない状態でしたから、千葉大の研究室の院生達に助っ人をお願いして来てもらうことにしました。次は、C棟全体のアース問題、これは、調査から原因究明、問題解決まで数ヶ月、当時の施設の長野係長にはずいぶん忍耐強い調査をやって頂きました。また、超強磁場発生装置自体にも数え上げることが出来ないほどの問題を抱えていました。その為に、C棟の地下ピットに硬い体を屈めながら這い回り、その度に低い天井のコンクリートに頭をぶつけ、何度頭にこぶを作ったか分かりません。特に、電磁濃縮及び一巻きコイル法の超強磁場発生装置電源は、その後、2005年に1度目、2度目は2011年の火災を起こすなど、使用者のちょっとしたミスがあったとしても、このようなことは安全設計上想定されていなければならなかったはずですが、発注者側の配慮不足と、1999-2000年柏移転時のニチコンの施工のずさんさと技術力低下を如実に示すものでした。1980年当初の見事な電源装置を完成させたニチコンの世界トップレベルの技術力は誠に残念ながら温存されてはいなかったのです。一様の動作はするがどこに不具合や危険な状態が潜んでいるか不明な装置との戦いが続きました。これに関しては、現在ではかなり解決し、収束に向かっているとはいえ、未だに悪戦苦闘の状態が続いています。

赴任から1年たち、千葉大での授業や引き継ぎ後片付けも一段落し、いざ、これから物性研超強磁場再立ち上げにと本腰を入れようとした矢先でしたが、それまで、超強磁場の様々な装置の維持を任されていた優秀な技術職員の池田悟氏が急な転職となり、途方に暮れる暇もなく、新たに電磁濃縮を手伝ってくれる技術職員の公募を開始することになりました。池田氏と入れ替わるように嶽山研助手として小嶋映二氏が着任、従って、一巻きコイル、電磁濃縮等超強磁場を熟知する助っ人はいない状況でのスタートとなりました。私も、10年以上超強磁場の科学技術分野を離れていたため、ほとんど忘れており、私の小脳がかろうじて覚えている状態でした。

後藤所員後任の形で非破壊型磁場(ロングパルス磁場)を担当する教授として金道氏が物性研へ赴任してくれたのも2004年です。阪大強磁場で既に教授になって1年立つか立たない金道氏に物性研強磁場にに来てもらったということは、すなわち、日本の強磁場業界の再構築の始まりを意味しております。時を前後して欧州、独仏蘭の主要国の強磁場施設では世代交代を終え、パルス、定常強磁場を合わせた新たな統合へと動き出していました。独国内ドレスデンは世界最大級の50メガジュールコンデンサ電源を導入した100テスラ計画に予算が付き本格的に稼働し始めました。このような状況から、日本国内の関係者の間では、阪大、東大、東北大といった枠を越えて、オールジャパンの強磁場施設の強化が必要との認識が広がりました。今から考えると非常にラッキーな事に、当時の原子力機構先端基礎研究センター安岡弘志所長から、当時の物性研強磁場にとって大変魅力的な提案が飛び込んできました。日本原子力研究開発機構において核融合試験装置JFT-2Mの一部として使われていた巨大発電機210メガジュール・フライホイール直流発電機廃棄されるが、これを受けパルス強磁場に使うって見てはどうかとの提案です。これこそチャンスとばかり、当時の物性研上田所長のリーダーシップの下に概算要求を開始することになりました。法人化されて初めての概算要求でしたから、ほぼ成功のチャンスは無いと思われていた、だめもとの挑戦でした。案の定、1年目は不発、2度目の再挑戦で2006年度から4年間の分割で予算要求を認めて頂くことになりました。これは、強磁場フォーラムの主立った方々、東大本部の事務方の多大な支援はさることながら、タイミング良く大型設備等再利用の政府答申がなされたことなど、幾つかの幸運が重なった結果だと思われまます。

しかし、この2006年度からの概算要求を行っている真最中でしたが、2005年9月に電磁濃縮超強磁場発生装置の電

源部から火災が発生したのです。それは当時の不慣れな若い人達がちょっとした操作ミスをした事が発端ですが、通常であれば、ちょっとした火花放電のスパークを起こし、数 cm の部分が焦げて軽傷で終わる程度のものはずでした。しかし、上述したようなニチコンの技術不足によるミス、すなわち、隠れた部分での不適切な部材使用により、これに印火、電源のギャップスイッチ部の火災発生に至りました。更に、当時設置されていた窒素ガス自動消火システムの管理ミスが重なり、初期消火活動を終えた直後のコンデンサー電源室の大部屋を私たち共々窒素ガスで一瞬にして満たすという悪夢のような事態に発展し、幸い人身事故はなかったものの結果的には大きな事故に発展しました。原因究明の調査や報告書、保険への対応、また、なんとと言っても、電磁濃縮装置自体の困難極まる修復等々、その後の半年は様々な対応に追われる毎日ということになりました。こともあろうに、類似の事故が去年の夏に、今度は一巻きコイル超強磁場発生装置電源でも起こりました。基本的な原因はほとんど共通でした。見えないところに危険が潜んでおり、いつしか、これを地雷と私は呼ぶようになりました。それでも、これまで暗闇の中手探りで地雷を外しながら進んで来ましたが、時折油断すると、未経験な兵士が地雷を踏むことがあります。現在は、ニチコンの製品を使用するときは、最悪の事態を想定し、また、ハード、ソフト両面で考え得るあらゆる安全対策を逐次行うことで対応することにしています。一般に使用予定者は、建物にしても、装置にしても、それが完成する前に、建設中でもかなり中に踏入り、業者に対して徹底的に目を光らせて監視する必要がありますが、1999 年の柏移転時にはそのようなことをする人も時間的余裕もなかったと推察されます。今から考えますと、2003 年の物性研赴任以来、激戦地最前線での死闘を繰り返してきた感がします。

#### 4. 電磁濃縮法超強磁場発生装置の再立ち上げ

さて、研究の話に戻します。2004 年から本格的に強磁場施設の整備に入ったことは前に述べました。電磁濃縮に関しては、柏移転直後、三浦研究室最終時期の 2000 年に「フィードギャップ補償」という手法を取り入れたコイルを開発し、また、新電源の改良もあって 600 テスラの室内世界最高磁場発生を達成していました。まだ不慣れな小嶋助手と 10 年以上もギャップのある私とどのようにこの「巨大な怪物」と戦うかを考えました。幸いにも小嶋助手はこの巨大な怪物の恐ろしさを知らなかったせいか、この電磁濃縮超強磁場開発に意欲を見せてくれました。このとき、幾つかの目標を設定しました。可能な限り「一巻きコイル法」程度には使いやすくする（これは、私が助手時代に行ったことですが、その後この一巻きコイルの装置が多く成果をだすことに貢献しました）。そのためには、1) 考え得るあらゆる箇所に徹底的に簡便化を施すこと。また、2) 再現性とできるだけ高い精度が出せる物性測定を行うことにより、数百テスラではじめて実現できる物理を展開していくことを目標と掲げました。

##### 4. 1. 背水の陣

ところで、1990 年代になるとロシアのサーロフや米国ロスアラモスでは、爆薬を用いた大がかりな 1000 T 超強磁場の発生が報告されておりました。1990 年代の終わりには日、米、露、独、豪、白等の多国籍研究グループによりディラック・プロジェクトとの呼び名の下に 1000 T を目指した物性測定実験が試行されています。しかし、論文タイトルには「800 T までの低温磁気輸送現象の測定」とはあるのですが、実際は、高温超伝導体 YBCO の臨界磁場やセレン化水銀というゼロギャップ半導体のシュブニコフ・ド・ハース振動の観測結果が示されているものの、大きなノイズの中で、かろうじて 300 T までのデータがなんとか物理的な現象をだしている様相がある程度のものでした。新しい物性物理を発見するということからほど遠いもので、超強磁場で物性物理の測定を行う事が如何に困難であるかが記述されています。物性研電磁濃縮による超強磁場は、野尻氏（現在東北大金研教授）の助手時代の大貢献で大きく進み、その代表的な仕事としてスピン・パイエルズ転移が磁性に関与する  $\text{CuGeO}_3$  のファラデー回転による磁化測定の大変優れた論文があります。しかし、これも、表題は「up to 500 T」となっておりますが、実際掲載されているデータは 350 T 程度です。私は、このようなことでは破壊型を用いた超強磁場の科学の将来は閉ざされる方向になるのではないかと危惧しました。実は驚くことに、良く調べて見ますと、世界でもこれまで 500 T 以上のまともな物性データは皆無といって過言ではありません。ここで、物性研の電磁濃縮からは、誰にでも真似できない、そして、誰もが驚くような物性物理のデータが出せるようにしなければならない、と強く思いました。何よりも、超強磁場ではじめて観ることのできる新しい物理を創出すること、それが、今後の物性研破壊型超強磁場に、そして、私に、課せられた使命であると自分に言い聞かせました。電磁濃縮で超強磁場を発生する技術は大変困難なものの、もはや磁場発生だけでは許されないわけです。

さて、しかしながら、磁場は 600 T で良いのか？新しい物理は 600 T までで出せるのかと考えました。私が超強磁場ブランクであった 1990 年代での物性研及び海外での論文を調べますに、どうも、600 T まででは、新しい物理を発見することは困難であるように見えました。困難極める実験をやらなくとも、測定物質の工夫、あるいは、磁場/温度 ( $B/k_B T$ ) の効果で、温度を下げることで、十分対応できる物理ができるのではないかと。そこで、直感ですが、サイクロトロン半径が 1 nm を下回る磁場値以上になれば、そこにはパラダイムがあるのではないかとあるに違いないと信じるようになりました。まるで、エベレストの頂きを麓から眺め、あの頂上に到達すれば何かすばらしいものが観られるに違いないと思うこととほとんど同じです。このことが、私をして、近角聡信氏が数十年前に掲げた 1000 T プロジェクトに再挑戦をさせることになったわけです。1000 T を実現すること、それだけでなく、そこで新しい物理を開拓すること、これら 2 つを私の退職までの目標とすることにしました。はっきり言って賢いまともな人は掲げないであろう無謀な目標です。そのためには、物性研強磁場を使って簡単に論文が排出できそうな研究テーマはなるべく閉じていくこと、一卷きコイルは確立していて、三浦後藤研で 1980 年後半から多くの論文を排出してきた論文排出の主力装置でもありました。しかし、これら一卷き超強磁場発生装置も電磁濃縮装置を用いた実験に繋げるために利用することにし、これだけでの実験で閉じないようなテーマを選ぶことにしました。まさしく、背水の陣の構えです。

#### 4. 2. 主コイル開発

まずは、電磁濃縮での超強磁場発生実験を初期の時代の方法に戻ってもう一度やり直すことにしました。コイル防爆室内でのコイルセッティングに集中できるような環境を作るために、明かりを採りや、新鮮な空気の入替えの工夫など、これまでの炭鉱発掘作業のような環境から解放することに努めました。50 歳を越えての重労働ですので、かなりの重量ある種磁場もスムーズにセッティングできるよう機械部に工夫を凝らしました。実験後の掃除も効率よくできるよう道具立てを揃えました。また、実験後の掃除も煤に紛れながらも自分で行う事で、破壊実験後の形跡から探偵のように様々な防爆室内の爆発時の様子を想像することができました。ですから、防護室内のどの位置が破壊の影響が強いのか、どこが安全かを数 cm の精度で知ることができるようになりました。そこで、内部に安物のビデオカメラをセットし、爆破実験中の一部始終をモニターできるようになりました。これは、見世物用として爆破の様子をビデオショットができるだけでなく、コイル周りの電氣的機械的な改良を行っていく上で随分役立つことになりました。

このようにして、前記の「フィードギャップ補償」コイルは後回しにして、従来使用されていたコイルを用いて実験を開始したのですが、後片付けに重点を置いたことで、それまで、20 年近く誰も気がつかなかったことに気がつくことができました。詳細は文献[1]に委ねますが、これは、磁場発生コイルとしては決定的な欠陥でありました。そこで、この欠点を補うコイルの開発を行うことにしました。これが、現在室内実験室世界最高磁場発生を可能にした「銅内張コイル」に他なりません。電磁濃縮法では、ライナーという銅の輪っかを主コイルの中に挿入します。電磁誘導により主コイルとは反対向きの大電流がライナーに誘起され、電磁応力により加速されて種磁場コイルからの初期磁束を濃縮して、最終的に、超強磁場を発生させるものです。従って、主コイルの内側に電流を集中させること、また、ライナー加速のためにはその反動を受ける為の慣性質量が必要です。内張コイルは銅薄板の内張りの方が前者を担い、外の鉄コイルが後者を担うという簡単な構造です。しかし、数百アンペアの大電流でかつ 4 万ボルトもの高電圧で使用するとその実現は容易ではありませんでした。基本的な設計ができてから、主コイルと内張銅の精度を合わせる事が難しく、安心して使えるコイルセットができるようになるまで 2-3 年を要することになりました。このコイルにより電気エネルギーから磁気エネルギーへの変換効率が従来のものよりおよそ 2 倍になり、ライナーの速度を上げることができるようになりました。磁束濃縮法では、得られる最高磁場とライナーの収縮速度には経験的なほぼ比例関係があり、より高い磁場を得るにはライナー速度の向上が重要です。

#### 4. 3. 種磁場開発

さて、このようなコイル開発がやっとの思いで軌道に乗り出した頃に、それまで 20 年間の長きに使用されてきた種磁場コイルがついに破壊しました。老衰です。ライナー速度の向上に伴い、初期磁場を強くする必要もあり、そこから、種磁場コイル開発が始まりました。種磁場の強度は、最終的に最高磁場に達したときの空間の大きさに関係しており、物性測定の為には低温容器など挿入することなどを考慮すると、最低でも直径 10 mm 位の空間に最高磁場の発生が必要です。

そのためには、ライナー収縮速度に加えて初期磁場の強度が要求されます。種磁場用のコイルは非常に大きいだけでなく、2つのペアで使用するスプリット型のパルスコイルです。もともとスプリット型の強磁場コイルは作製が難しいのですが、電磁濃縮の場合、その直前でコイルが大爆発を起こすわけで、毎回の実験で起こるこのすさまじい衝撃に耐えうる構造にしなければなりません。従来の種磁場コイルは3 T出すのがやっとでしたが、4 Tを越える磁場が発生できるようになりました。しかし、ライナー速度向上に伴う衝撃波強度増大により種磁場コイルの損傷は激しく、これまでに、10セット(20個以上のコイル)以上作ったこととなります。最近では、電磁濃縮の開発は、もっぱらこの種磁場コイル開発に多大の時間と労力を費やす状況となっております。図1に、之までに採用されてきた主コイルと合わせて得られたピーク磁場の値を年代とともに示しております。各年で最高磁場値の低いものは、磁場計測ピックアップコイルが途中で切れたり、濃縮失敗したもの、また、物性測定の為に大きな空間を確保したために低い値になったもの等、必ずしも最高磁場出しが目的でない実験結果もプロットしてあります。開発に成功した銅内張コイルは効率よく高い磁場が出せるだけでなく、コイルのセッティングが格段に容易になり、再現性が確保されたことが重要な成果です。図2は、室内実験室としては世界最高記録を更新した時の磁場の波形と、ライナーの収縮の様子を示しております。

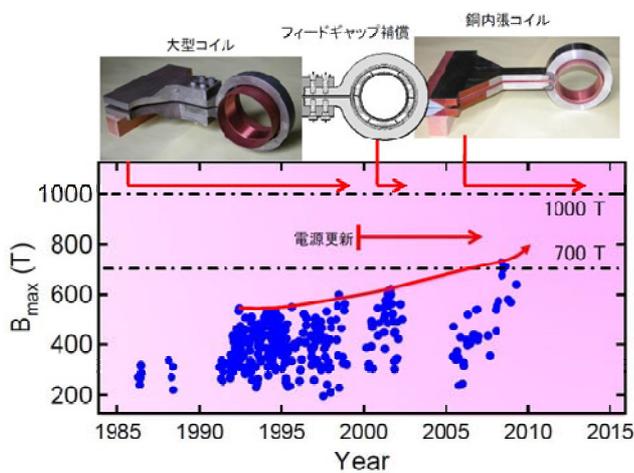


図1. 「電磁濃縮法」により超強磁場を発生し、物性研究に応用している。物性研お家芸の一つである。このプロジェクトは1980年初頭に開始され、悪戦苦闘の長い技術開発の結果、現在では室内実験として世界最高の730 Tを記録するに至っている。コイルは磁場発生直後に電磁応力によるすさまじい爆発力(ダイナマイト数本分に相当)によって完全に破壊される。残るのはデータとコイル破壊後の残骸だけである。これまでに、高エネルギーコンデンサ電源の高速化や、コイル構造への工夫など様々な技術開発がなされてきた。図は最高発生磁場の値を年代ごとにプロットしたものである。図の上部には、コイル構造の工夫における大きな革新とその時期を示す。

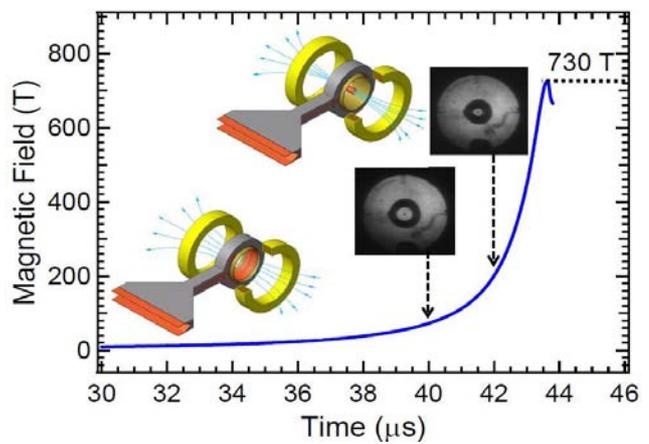


図2. 室内世界最高の730 Tという磁場発生瞬間をとらえた磁場波形を示す。大型の高速コンデンサ(4 MJ)から大電流(4 MA)を一巻きコイルに放出し、電磁応力を利用してコイル内にセットした銅のライナーを高速に収縮させる。これにより初期磁場(4 T)を濃縮する。銅のライナーがコイル中心に向かって美しい対称的な円形を保ちながら収縮する様子を超高速度コマドリ写真がとらえている。写真で円の中心の点に見える影は磁場測定用のピックアップコイルを巻いた直径2 mmほどのプローブである。最終段階では、直径6 mmほどの空間に最高磁場の730 Tの磁場が発生している。物性研究所では磁場発生技術の開発だけでなく、超強磁場を磁性体などの物性の解明に用いるべく様々な計測手法の開発を行い、極限環境下での新奇現象を探索している。

## 5. 超強磁場での物性研究

電磁濃縮法による磁場出しの開発がある程度軌道に乗ってきたので、肝心の物性測定です。これに関しては、ほぼ磁場出し開発と平行して進めてきました。主なテーマとして、1) 半導体 2次元電子系の超強磁場磁気光学効果、同様の系での高密度励起効果の研究、2) カーボンナノチューブの超強磁場でのアハラノフ・ボーム効果の光磁気的手法による観測、それから、3) 幾何学的フラストレート磁性体の超強磁場磁化過程の3本柱です。人手が少ないので、テーマはなるべく絞り、人力の分散を防ぐべきと考えました。1) のテーマは千葉大時代までの研究テーマの中から超強磁場にスムーズに移行する為のものとして位置づけました。

## 5. 1. カーボンナノチューブの磁気光学吸収

カーボンナノチューブの励起子スペクトルを使った安藤・安食理論に基づくアハラノフ・ボーム(AB)効果によるスペクトル分裂の観測に向けた研究は、2003年赴任早々から準備を開始しました。カーボンナノチューブは直径1 nm、平均長100 nm-1  $\mu\text{m}$ 、このミクロの物質がランダムな配向状態で液体の中に分散しています。光励起してやるとバンド間遷移から励起子スペクトルが観測されます。最終目標は当然電磁濃縮を用いた数百テスラでの測定です。定常磁場やロングパルスでの測定ならば発光測定が有利ですが、破壊型超強磁場は1  $\mu$ 秒以下という短い露光時間、しかも、積算ができない一発勝負ですので、吸収測定しかありません。吸収スペクトルであれば光源さえ強ければ後は濃度の調整によりコントラストがとれて、 $\mu$ 秒以下の露光時間でもなんとかなりそうです。また、これまでの半導体微粒子の磁気光学研究の経験から発光スペクトルは真にコヒーレントな状態を反映しません。欠陥や不純物からの強い発光を捉えてしまう可能性が高いため、バンド電子に似た振る舞いはするものの、必ずしもそれを反映しないのです。そこで、様々な困難は予想されるものの磁気吸収測定にこだわりました。液体中に分散した微粒子の吸収測定が正しくできるのかも自明ではありません。また、出来たとしても、液体サンプルをパルスマグネットに入れるということも初めての経験で、試料ホルダなど様々な工夫が必要です。まずは非破壊ロングパルスを使って吸収スペクトルを測定することから始めることにしました。最初の大学院生中村修司君(2004-2006年在籍)には磁場でランダムな配向が磁場印加によりどのくらい配向するかを見積もるために偏光分光法を使って調べてもらいました。また、このとき、一卷きコイル超強磁場で $\mu$ 秒の露光時間で測定可能であるという目途をつけてくれました。次にこの仕事を大坪勇貴君(2006-2008年在籍)が引き継ぎ、東大工学部の丸山研究室からの試料の支援を受けて、本格的に電磁濃縮での実験へと進めてくれました。液体中のカーボンナノチューブをガラスセルに封入するのですが、電磁濃縮で超強磁場が発生できるのは数十ナノ秒という光検知器の露光時間との戦いだけでなく試料空間も出来るだけ小さくする必要があります。このような環境で光学系を組んで十分な信号強度をとることは容易ではありません。更に、ロングパルスの実験でさえ1 [O.D., Optical Density:光学密度] 程度の吸収強度が要求されるのに、その50分の1程度の強度(コントラストと言っても良い)しか取れません。このような困難を克服してやっと得られた結果が図3です[2]。間違いなくカーボンナノチューブの光学吸収としては世界で一番高い磁場まで計れたデータと言えます。しかしながら、試料がランダム配向であり、カーボンナノチューブ軸方向の有効磁場成分の分布が大きくなる(簡単に100 T位になる)ことや、試料の中に様々なカイラリティ(従って、いろいろな直径)のチューブが混在することで、超強磁場での光吸収スペクトルが重複したりして複雑になり、残念ながら決定的に何か結論が出せるデータにすることは出来ませんでした。

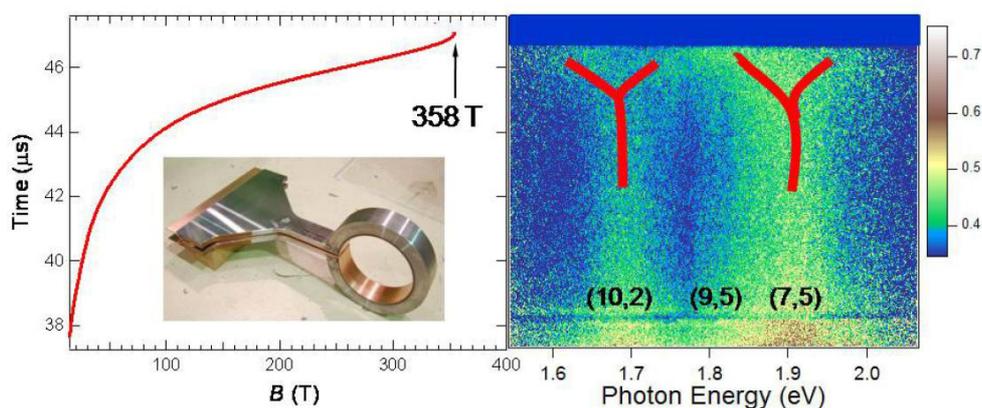


図3. 新型銅内張コイルを用いて360 Tまで測定に成功した液体に分散されたカーボンナノチューブの磁気光学吸収スペクトルを示す。(10,2)等はカーボンナノチューブのカイラリティを示す。左図が磁場の時間発展、右がその発生時間に対応するカーボンナノチューブの吸収スペクトルの変化。赤線が励起子吸収線のアハラノフ・ボーム効果による分劣をたどることができる。最高磁場での分裂は0.1 eV以上にも及ぶ。ガラスセルに入った液体溶液であることと、磁場印加方向の制限から大きな磁場発生空間が必要で、そのため、最高磁場は制限されている。

ここで余談になりますが、この大坪君に関して今から思えば微笑ましいエピソードがあります。彼は、この測定を立ち上げるために大変苦勞し、修士の最初の1年間は失敗の連続でした。また、就職活動も連続不発が続いておりました。しかし、測定系は苦勞の末、今度こそは絶対行けると自信をもって実験に臨みました。電磁濃縮装置を使った実験では長

い期間の準備の後に構築したものが全て一発で全部破壊します。データだけを残して準備したハードウェアは全て大気の藻屑となります。スケールは異なりますが、まさにあの宇宙探査機はやブサが、気の長い準備の後、イトカワ探索への役目を果たし、人類にその知見を引き渡した後、天空の塵となるという点で大変類似しております。話を戻しますと、彼の1年に及ぶ悪戦苦闘の後、最初の成功が期待された実験でした。準備は100%完璧でした。がしかし、たまたま、電磁濃縮用電源のギャップスイッチの1つがミスファイヤしてしまいました。ギャップスイッチ120個をナノ秒のオーダーで同期させ、最終的なスイッチで大電流をコイルに放電するのですが、この1個のスイッチがファイヤミス(誤動作)すると磁場発生は失敗に終わります。もちろん、実験データを上手く捕らえる事が出来なくなるばかりか、準備したコイル、試料からそのホルダ等全てが破壊されます。実験が順調な場合は、コイル室内は一瞬にして火煙が立ち上りますが、ファイヤミスの場合は、コイルや試料は破壊されますが、防爆コイル室内は凍としたままで、煙は立ち上がりません。その時、ふと横を見るや彼の周りに黒い煙の気が立ちこめてます。さらに目から涙が滲み出てます。正常放電であれば、ファイヤ直後私が液体窒素を持って防爆室に走り込み、中の火煙の消火を行うのですが、院生から立ちこめる煙を消す術は持ち合わせません。電磁濃縮装置の制御盤の前で2人呆然と立ちすくむのみでした。その夜中にメールで励まし、その後、就職も旨く行き、彼は見事復活、実験も成功し、修論も無事立派に終えて卒業しました。苦労の末、電磁濃縮を使った物性測定に成功したときの感慨は忘れられないものです。図4は、成功直後のスナップ写真です。大坪君は、現在元気に某一流企業で大活躍しております。このような経験は就職した後も企業でもいろいろな困難に立ち向かうのに役だっているとのこと。その後、カーボンナノチューブの研究は次の大学院生鈴木弘郁君(2008-2010年在籍)に引き継がれ、PFOカーボンナノチューブというカイラリティが特定された試料を用いて78Tの強磁場まで励起子吸収の分裂を見事に捕らえる事に成功しました[3]。この実験で、カイラリティが特定されていても、やはり、ランダム配向では強磁場印加には限界があることが分かり、現在でも、院生の佐々木達哉君(2011年-)が、今度は延伸配向した試料を用いて電磁濃縮での実験に再挑戦しています。他方、2009年度から研究室に配属され、現在博士1年の齋藤宏晃君はグラフェンの超強磁場での磁気光学的研究にチャレンジして様々な困難との対戦中です。

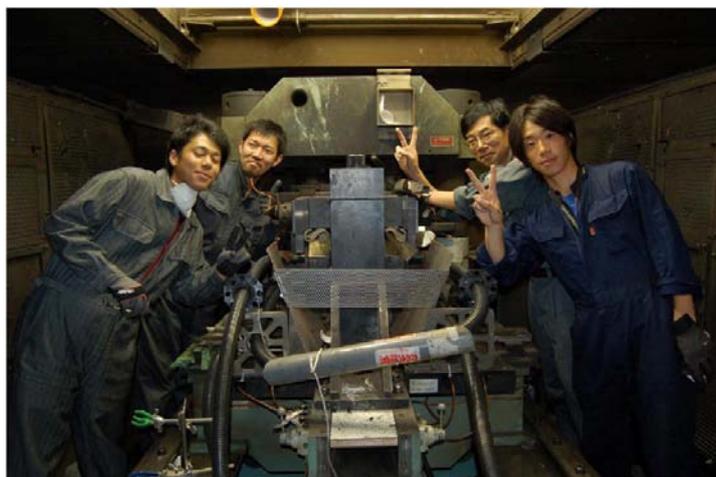


図4. 悪戦苦闘の結果始めてカーボンナノチューブの磁気光学吸収測定に成功したときの勝利のスナップ記念写真。この時は、ファイヤ直後はこの防爆室内で硝煙が立ち込めました。右から、大坪君(M2)、嶽山、小嶋助手、鈴木君(M1)。

## 5. 2. 幾何学的フラストレート磁性体の超強磁場磁化過程

電磁濃縮での超強磁場でやるべき物性研究として、磁性体でもその有用性を示すことが必要と考えました。当時、後藤研の三田村氏と上田寛研の植田氏が共同研究で行っていた  $\text{HgCr}_2\text{O}_4$  や  $\text{CdCr}_2\text{O}_4$  といった幾何学的フラストレーションを持つ磁性体が有望な候補であるように見えました。 $\text{HgCr}_2\text{O}_4$  は既に45Tまでパルス磁場で磁化測定が行われ、スピン格子相互作用に起因した「1/2 プラトー」など美しくまた面白い物理が報告されていました。更に、同様の物質で  $\text{CdCr}_2\text{O}_4$  や  $\text{ZnCr}_2\text{O}_4$  ではスピン間の交換相互作用も更に強く飽和磁化まで測定するには100T以上の磁場が必要と予測されました。また、何より、構成物質から判断しても光計測との相性が良いと直感できました。光を用いたファラデー回転で

強磁場磁化過程を明らかにすることができる格好の磁性体であると思われました。また、結晶も良質の単結晶が得られ、超強磁場での測定を行うのに十分な大きさです。特に、 $\text{CdCr}_2\text{O}_4$  はペレット状であり、薄膜研磨が容易で光学測定に向いています。大学院生宮部翔君(2005-2007 年在籍)の修士の課題として、まずは、一巻きコイル法でファラデー回転を初めとした磁気光学測定に取り組むことにしました。ファラデー回転も光学遷移を考慮し、用いる光源の波長を選べば、かなり高い精度で磁化に比例すると見込まれました。Cr 内殻  $d-d$  遷移吸収スペクトルを慎重に測り、レーザー波長を選んで、横一巻きコイル法によって 140 T までの磁化を広い温度範囲で正確に測ることに成功し、温度-磁場の磁気相図を決めることができました[4]。その後、この研究は、宮田敦彦君(2008 年-)に引き継ぎ、飽和磁化までに更に強い数百テラの超強磁場が必要とされる  $\text{ZnCr}_2\text{O}_4$  を用いて本格的に電磁濃縮を用いた磁化過程の測定に挑戦することになりました。一巻きコイルを用いた実験まではスムーズでしたが、電磁濃縮装置に実験系を移すと同時に様々な困難が私たちの前に立ちはだかりました。当時の電磁濃縮ではより高い磁場を実現するのにライナー収縮空間の真空度を従来より 1 桁以上上げる必要がありました。ここでは、一巻きコイルで使用していたベークライト製のクライオスタットが通用しません。低温でヘリウムがわずかに漏れ、真空度を悪くするのです。そこで、より小さい外径でよく冷え、真空を漏らさない新たな光学測定用クライオスタットの開発が必要でした。宮田君は修士のほぼ半分をこの開発に費やすことになりました。失敗の繰り返しです。1 年間も新たなデータが出ない月日にひたすら耐えてくれました。指導教員にとっても院生が努力しているにも関わらずデータがでない状態が続くのは辛いものです。更に、博士進学しての 1 年間は順調でしたが、その次の年は、今度は電磁濃縮装置側の不調が続き、やはり、ほとんどともなデータが得られないという 1 年間を迎えました。電磁濃縮磁場発生の方は私を始め職員で責任を取る体制をとっておりましたので、本人がどうにもできないところでの失敗の連続でした。それでも彼は辛抱強く耐え、磁場発生に関わる問題が解決したとたんに、多くの成果を得ることが出来ました。物理的な議論に十分耐える磁化に関するデータが 600 T まで測定できました。また、それも 4.6 K という極低温です(図 5)。これは人類未踏のデータでもあります。この系でスピン格子結合の弱い極限で Penc 等が理論的に予測していた「キャント相」を見つけることができました。Penc 等は 100 T 以上で起こる現象であるので、まさか誰も実証できないと思っていたようで、彼らを歓喜させるデータとなりました。また、1/2 磁化プラトーが温度上昇によって安定化しているのを観測し、系の乱れが秩序を安定化するという”order by disorder” 現象を発見しました。これは、3 次元系において初めての観測です。更に、光磁気吸収スペクトルを上手く利用することで、強磁性飽和相の低磁場側に Penc 等による理論では説明できない磁気相が見つかりました[5]。

## 6. 終わりに

上記の他に、縦一巻きコイルを用いた 100 T 強までの誘導法による低温磁化測定システムの開発に大学院生の坂倉亮君(2008-2010 年在籍)が大いに活躍してくれました。この結果は、彼の卒業後 1 年以上たってやっと論文にしましたと

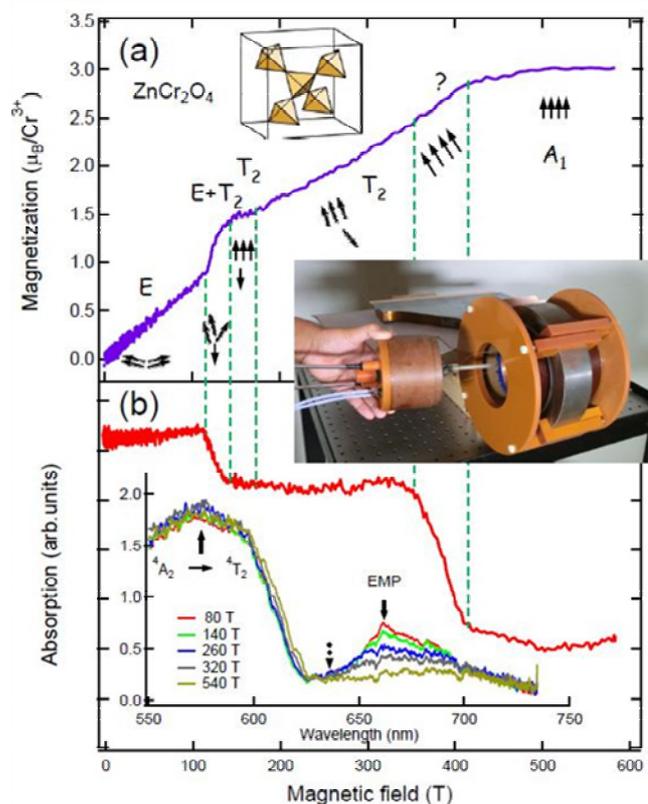


図 5. (a) 新型コイルを用いた電磁濃縮法で 600 T まで測定に成功したフラストレート磁性体  $\text{ZnCr}_2\text{O}_4$  のファラデー回転によって得られた磁化過程と見つかった 7 つの磁気相。(b) 磁気光吸収で観測される Cr 内  $d$  電子内殻遷移( $A \rightarrow T$ )とその長波長側に見られる励起子、マグノン、フォノン(EMP)吸収。この吸収スペクトルの超強磁場での磁場変化から磁化では観測しがたい新しい磁気相(?マークのところ)を見つけておくことができた。写真は、宮田君が 1 年以上かけて開発した自作の極細液体ヘリウムフロー型クライオスタット。600 T という超強磁場で 4.6 K の極低温を実現できたのはこのクライオスタットの性能に因る。これも人類未到の貴重なデータである。

ころ[6]、極低温で磁化の絶対値が精度良く測れるというので国内外から高い評価を得ることができました。1980 年後半、当時後藤研客員で来られていた阪大の天谷喜一氏と六本木時代の横一卷きコイル装置を用いて死闘を繰り広げ、世界で始めて 100 T 近くまでの磁化測定を可能とした快挙から 20 年以上が過ぎてからの仕事です。当時の技術では大きなバックグラウンド信号が排除できず、磁化の微分信号によって磁気相が正しく評価できる程度でした。先日、天谷氏から年賀状を頂き、論文を読んだぞ、見て当時を思い出し涙したと書いてありました。今回の開発では、当時、次に何をすべきかが分かっていたので、あのときほどの死闘はありませんでしたが、やはり、前人未踏の領域を開拓することは、年齢を超えて青春を燃やせるものです。

実験室の状況がやっと落ち着いてきた頃、たいへんありがたいことに、文部科学省最先端研究開発戦略的強化費補助金(最先端研究基盤事業)にて「次世代パルス最強磁場発生装置の整備」の競争的資金を頂くことが決まりました。退職前の最後の仕事として、まさに次世代の為に電磁濃縮用電源と磁場発生装置を新たに組み上げて行く事になります。この計画では、先ず、2 MJ の電源を入れて、比較的中規模の電磁濃縮装置を導入します。その直後 5 MJ の電源を導入します。それぞれにコイル室(これをマグネットポートと呼ぶ)を設けます。また、現有ニチコン社製の 5 MJ の電源はスペース確保の為に 3 MJ 分を取り除き、2 MJ を残します。従って、磁場発生できる防護箱が新旧合わせて 3 ポートとなります。これらは目的に応じて使い分けることができるようにします。新システムでは電源インピーダンスが改善され、また、電源電圧を上げることによって磁場発生効率が上がることが期待できます。新 5 MJ 電源システムを用いて磁場のより高いピークを狙います。1000 T を最終目標にします。また、新 2 MJ のシステムで磁化測定、光学測定など目的に応じて数百テスラ領域での物性測定を行います。電磁濃縮を用いた物性測定では全破壊型で有るが故に、コイルや測定系のセッティングにマグネットポートを占有します。そこで、ポートが 3 つに増えることは、準備を含めた時間を各ポートで分散できることから、全体として実験回数をあげることができます。そもそも成功率が低いという実験の性質上、試行錯誤で実験の最適化を測ることが多く、その意味で実験回数を上げることは研究の効率を格段に上げることに繋がります。

最後になってしまいましたが、2006 年秋から澤部博信氏が技術職員として赴任してくれました。電磁濃縮電源の隅々までのメンテナンスから電磁濃縮に関わるあらゆることに対応してくれています。今や澤部氏なしでは電磁濃縮を使った実験ができないと言うほどに成長してくれています。また、2008 年度からは松田康弘所員が破壊型超強磁場担当で、嶽山所員と密に連携して研究室運営にあたるという物性研では新たな試みの准教授所員ポストとして赴任、続いて、2010 年度からは、意欲的で闊達な中村大輔助教が赴任してくれました。電磁濃縮周りは教授 1、准教授 1、助教 1 で運営して行くという新たな力強い布陣ができました。2012 年は新年、辰年を迎え、天に昇る辰の様に超強磁場科学に向かって世界に類無き成果を目指して新たな挑戦を続けたいと念じております。

## 参考文献

- [1] S. Takeyama, and E. Kojima, "A copper-lined magnet coil with maximum field of 700 T for electromagnetic flux compression", *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** (2011) 425003.
- [2] S. Takeyama, H. Suzuki, Y. Otsubo, H. Yokoi, Y. Murakami, and S. Maruyama, "Aharonov-Bohm Exciton Splittings in Carbon Nanotubes in Ultra-High Magnetic Fields", *J. Phys.:Conf. Ser.* **334** (2011) 012056.
- [3] S. Takeyama, H. Suzuki, H. Yokoi, Y. Murakami, S. Maruyama, "Aharonov-Bohm Exciton Absorption Splitting in Chiral Specific Single-Walled Carbon Nanotubes in Magnetic Fields of up to 78 T", *Phys. Rev. B* **83** (2011) 235405-1.
- [4] E. Kojima, A. Miyata, S. Miyabe, S. Takeyama, H. Ueda, Y. Ueda, "Full-magnetization of geometrically frustrated  $\text{CdCr}_2\text{O}_4$  determined by Faraday rotation measurements at magnetic fields up to 140 T", *Phys. Rev. B* **77** (2008) 212408.
- [5] A. Miyata, H. Ueda, Y. Ueda, H. Sawabe and S. Takeyama, "Magnetic phases of a highly frustrated magnet,  $\text{ZnCr}_2\text{O}_4$ , up to an ultra-high magnetic field of 600 T", *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 207203.
- [6] S. Takeyama, R. Sakakura, Y. H. Matsuda, A. Miyata, M. Tokunaga, "Precise Magnetization Measurements by Parallel Self-Compensated Induction Coils in a Vertical Single-Turn Coil up to 103 T", *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 014702 .

# 研究室だより

## 上床研究室

極限環境物性研究部門 上床 美也

### 1. はじめに

物性研に赴任したのが 2001 年 4 月だったので、早くも 10 年が過ぎました。通常、5 年を過ぎたあたりで執筆することになっているのですがだいぶ遅れてしまいました。これまで、研究室では高圧力発生装置を研究プローブとし、様々な物質の圧力効果を研究しております。温度、磁場に並ぶ物理パラメーターである高圧は、最近、様々な分野で採り入れられ、多くの研究成果が物理学会をはじめとする発表の場で数多く見受けられる様になって来ました。これも、諸先輩方の努力の結果、市販のピストンシリンダー型圧力発生装置がより簡便に使える様になり、精度良い結果を比較的簡便に得られる様になって来ているからだと思います。この機会に、この 10 年を振り返るとともに、研究室の様子を述べていたいと思います。これまでの研究を振り返りながら下記に恒例のメンバー表を示します。このメンバー表を眺めつつ読んでいただけると幸いです。

年度	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011
助教		藤原直樹		辺土正人					松林和幸		
技術職員				小山(中澤)和子					宗像孝司		中澤和子
技術支援員		M. Abiz			陳林		松本武彦				
秘書								加藤真里子			川畑絵美
研究員	辺土正人		藤原哲也			栗田伸之	狩野みか			久田旭彦	
客員		梅原出	梅原出		糸井充徳	稲田佳彦	中島美帆	中島美帆井澤公一		名嘉節	名嘉節
学生	石井康之 横山昌樹		S. Tozar E. V. Sampathkumaran	栗田伸之 小枝真仁	狩野みか	荒木千恵子	長谷川啓	山田篤人	C. Ganguli	寺井達哉 平山貴士 山中里奈	田中斗志貴
		高澤直裕		才賀裕太 富岡史明	橋浦朔 山本英明			C. L. Huang		目崎雄二	佐々木龍
						高城重宏 小林広貴				川村幸裕	

### 2. 共同利用

物性研が柏に移転を完了した翌年の着任であり、建物、生活環境等がほぼ整備され、助教の藤原直樹さん、東堂栄さん、森多美子さん、研究員の辺土正人さん、学生の石井康之さん、横山昌樹さんとの船出でした。右も左もわからない状態でしたが、研究室の皆さんに助けられ何とか航海しておりました。2001 年 12 月には助教として辺土正人さんを迎え、本格的な研究が始まりました。研究室では、希釈冷凍機、超電導磁石、キュービック圧力発生装置、x 線回折装置などなど、多くの装置が既に準備され、我々を待ち受けている状態でしたので、これを如何に効率よく稼働させ、共同利用に供することが最初の仕事だったと思います。幸い装置は、毛利信男先生および竹下直さんによりしっかり整備されていたので、翌年の 2002 年から共同利用を受け入れる事が出来ました。今年(2011 年度)の共同利用は、約 50 テーマを受け入れています。ほぼ変わらない数の共同利用を 2002 年度より毎年受け入れています。この様な共同利用を受け入れて来られたのも、スタッフ、特に助教の辺土正人さん、松林和幸さん、PD および学生諸氏の協力があればこそです。ここに改めて感謝いたします。共同利用は、各研究室で温めた研究テーマを、物性研究所の装置やアイデアを用いて研究し、完成させるシステムであり、物性研の持つ使命の一つであります。研究室で受け入れてきたテーマは、各方面の専門家により

厳選されているため一緒に研究を行うことにより多くの勉強をさせていただいています。共同利用によって壊れた装置、発展した装置、新しい発見等、いろいろありましたが、総じて研究を前進させる方向に進んでいます。2011年4月には、技術職員の中澤さんが退職され、これまで同様に共同利用を進めるには困難な状態ですが、今後も積極的に進める所存です。皆様のご支援よろしくお願い致します。

### 3. 低次元有機導体の圧力効果

上述の共同利用で埼玉大学の谷口弘三先生によって持ち込まれた、単結晶試料  $\beta'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>ICl<sub>2</sub> の電気抵抗の圧力効果の測定を行いました。この物質は、BEDT-TTF 分子をカチオンとしアニオンの ICl<sub>2</sub> を結合させた結晶で有り、常圧では、バリバリの反強磁性絶縁体です。分子性導体は分子間がかなり広い為、通常、圧力により簡単にサイト間の距離が縮まり、比較的低い 1 GPa 程度の圧力で金属化や超伝導を出現させることが可能です。BEDT-TTF 分子を持つ物質においても多くの超伝導体が発見されています。しかしながら、この物質は、金属化させるのに 6 GPa のも大きな圧力を必要としました。と同時に、この物質を超伝導化するためには、高い静水圧性も必要でした。実際、この物質の超高压研究は、すでにダイヤモンドアンビルを用いて行われておりましたが、超伝導の発見には到りませんでした[1]。このような状況から、この研究では、高い圧力と高い静水圧を併せ持つキュービックアンビル圧力発生装置を用いて、超高压での物性研究を行いました。結果についての詳細は、参考文献[2]を読んでいただきたいが、6 GPa 以下での、半導体的振る舞い、6.5 ~ 6.75 GPa で、圧力誘起の金属-絶縁体転移、さらに、7 ~ 7.75 GPa で、超伝導出現を予感させる低温でのカuspが観測され、8 GPa 以上では全温度範囲で金属的温度依存性を示しました。図 1 に低温部の各圧力下における電気抵抗温度依存性を示します。全温度領域において金属的振る舞いを示した 8.0 GPa では、電気抵抗 0 が観測され、 $P = 8.2$  GPa ではオンセット 14.2 K、ミッドポイント 13.4 K、の超伝導転移を示した。当時、有機化合物の示す超伝導転移温度は $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl における 13.1 K(0.05 GPa、オンセット)であったため、13 年ぶりの記録更新となる測定結果でした。この時、無冷媒の超電導磁石付きのキュービックアンビル装置が整備されており、直ぐに再現性、磁場依存や電流依存等の測定を行うことが出来、興奮しながら測定を行ったことを記憶しています。尚、この研究は研究室で観測した初めての圧力誘起超伝導体でした。

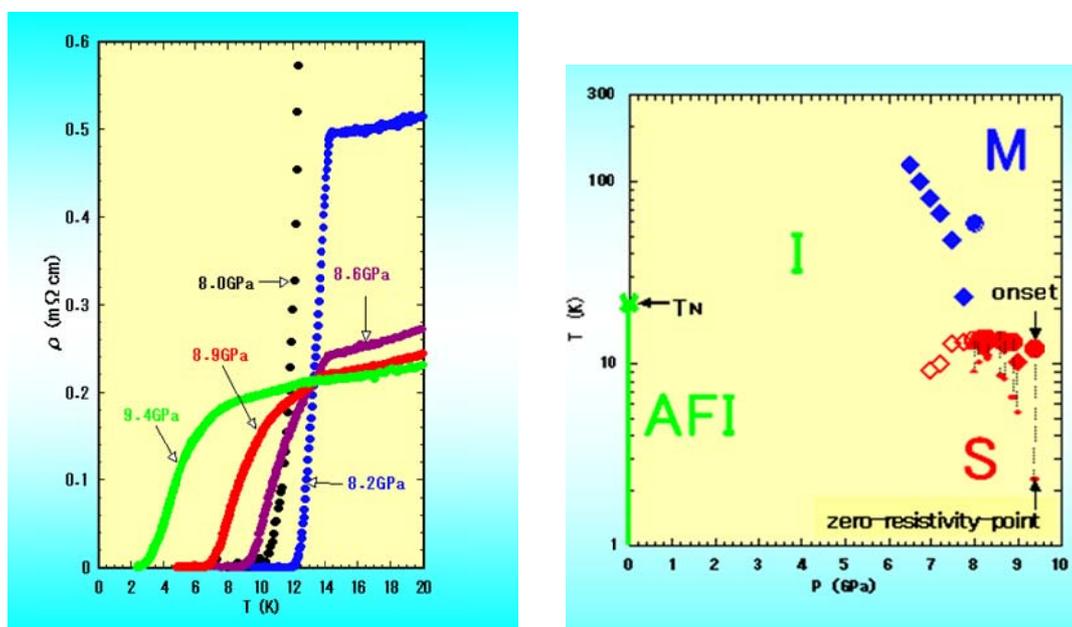


図 1 各圧力での電気抵抗の温度依存性と圧力相図

また、同時期に共同研究として分子研の中村敏先生から頂いた(TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>の測定を開始しました。この物質は、有機物質で初めて発見された超伝導物質(TMTSF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>( $T_c = 0.9$  K、 $P_c = 1.2$  GPa 1980年[3])と同様の結晶構造を持ち、(TMTCF)<sub>2</sub>X( $C = \text{Se}$ と $C = \text{S}$ )系物質群の中で、当時最も体積の大きい(化学圧力効果が最大)物質でした。これらの物質群は現在も尚、精力的に研究されています。(TMTCF)<sub>2</sub>Xは、一次元方向( $a$ 軸方向)に積層したTMTCF分子の $\pi$ 電子の重なりによって、一次元鎖方向に強い伝導を示します。アニオン $X$ を変えるとTMTCF鎖間の相互作用の大きさが制御され、 $C$ と $X$ の組み合わせにより、同じ結晶構造を持つ体積の異なったさまざまな物質が合成出来、それぞれの物性の違いをケミカル圧力として理解できる特徴を持っています[4]。

ここで(TMTCF)<sub>2</sub>Xの基底状態を圧力のパラメーターとして概観すると、ほとんどの(TMTSF)<sub>2</sub>X系物質では、常圧、低温でスピン密度波(SDW)を示し、約1 GPa程度の高圧、低温で超伝導を示します。(TMTSF)<sub>2</sub>Xより圧力相図負圧側に位置する(TMTTF)<sub>2</sub>X( $X = \text{PF}_6, \text{AsF}_6$ )では、常圧、低温でスピンパイエルス(SP)と電荷秩序相(CO)を示し、約5 GPa(50万気圧)という超高圧力下で超伝導を示します。これらの電子状態相図は、1991年にJ  romeにより体系化され、“J  rome相図”として現在も広く知られています[5]。しかし、体積の大きい(TMTTF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>における圧力誘起超伝導( $P_c \sim 5$  GPa)が報告されたのは2000年であり[6]、(TMTTF)<sub>2</sub>AsF<sub>6</sub>の圧力誘起超伝導( $P_c \sim 4.5$  GPa)の報告は最近の2007年です[7]。その理由として、2 GPa以上で、物性測定が可能な静水圧性の良い圧力発生技術の開発が遅れていた事があげられます。

(TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>の常圧下の基底状態は、“J  rome相図”のさらに負圧側に位置し、この物質は他の系にはない反強磁性秩序( $T_N = 8$  K)が常圧の基底状態であるため、J  rome相図に従うかどうか甚だ疑問でした。キュービクアンビルセルを用いた高圧下電気抵抗測定を当時修士2年生だった荒木千恵子さんを中心に行いました。(TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>の圧力誘起超伝導は、当初の予想通り観測することに成功しましたが、その超伝導出現の圧力範囲は5.4 GPa ~ 9 GPaと異常に広く、これまでの(TMTTF)<sub>2</sub>Xの報告と異なった結果が得られました。また、超伝導転移温度は2.8 K( $P_c = 6$  GPa および 9 GPa)であり、この物質群で最高の超伝導転移温度を示すことが明らかに成りました。さらに博士過程に在籍していた狩野みかさんを中心に、ターンバックル式のダイヤモンドアンビルを用いた高圧力下・高磁場下における(TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>の伝導特性が調べられました[8]。またアニオンを変えた物質の圧力下電気伝導特性を当時博士研究員であった糸井充穂さんが調べ、図3に示された、(TMTCF)<sub>2</sub>X系の圧力相図を新たに“拡張J  rome相図”として提案しました[9]。この提案した相図は、SbF<sub>6</sub>の基底状態が圧力増加と共に、反強磁性→スピンパイエルス(現在ではスピンギャップ相[10])→反強磁性→SDW→超伝導と変化する事を示唆しています。本研究で明らかにされた圧力誘起超伝導の特異な幅広い超伝導相の起源、リエントラント反強磁性の出現機構[10]については、現在検証中です。さらに、中村敏和先生の精力的な物質開発により、より体積の大きい(TMTTF)<sub>2</sub>TaF<sub>6</sub>の作成も行われ、高圧力下の伝導特性について現在糸井充穂さんを中心に研究は進んでいる最中であり、近い将来、一次元有機超伝導体における理解がより深まると思われます。

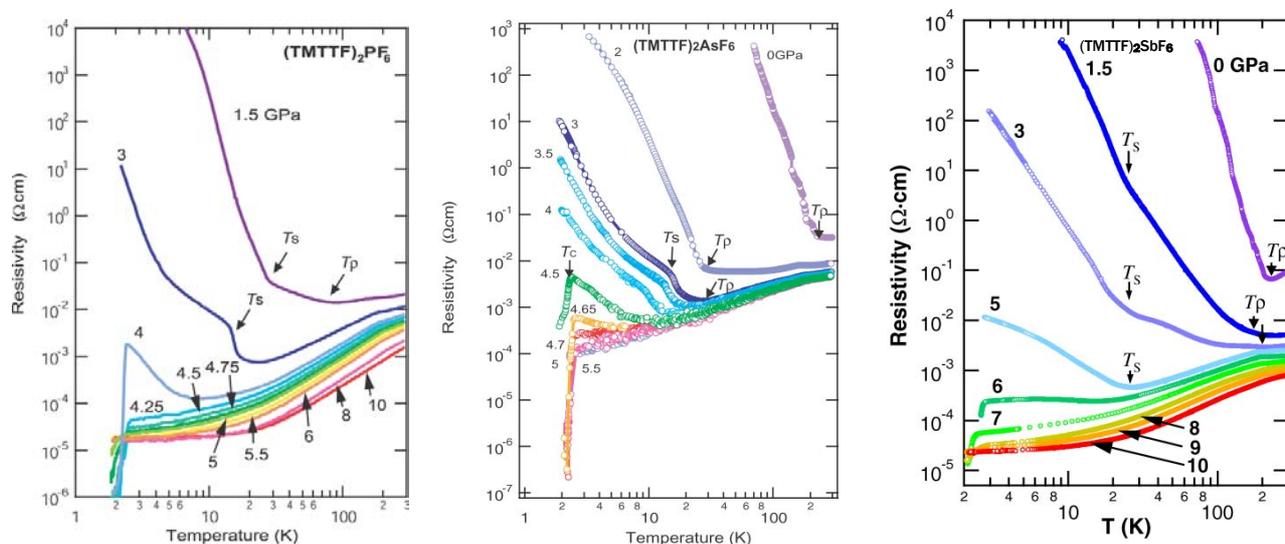


図2 キュービクアンビル圧力発生装置による高圧力下(TMTTF)<sub>2</sub>X ( $X = \text{PF}_6, \text{AsF}_6, \text{SbF}_6$ )の圧力下電気抵抗

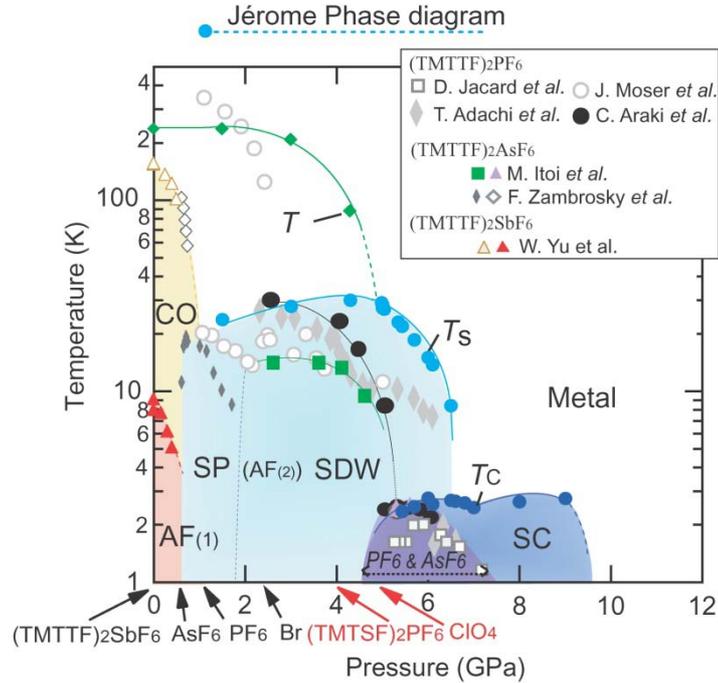


図3 (TMTCF)<sub>2</sub>X系の圧力相図(拡張 Jérome 相図)

#### 4. 重い電子系化合物の圧力効果

Ce 化合物

着任以前から、圧力誘起超伝導体の探索を目的に、色々な物質の圧力効果の研究を行っていました。温度が足りない、圧力が足りない等々の理由で、希土類金属間化合物での発見には至っていませんでした。着任後は、辺土正人さんを中心に栗田伸之さん、小枝真仁さんと希釈冷凍機にピストンシリンダーをぶら下げての実験の日々でした。詳細は後に述べますが、NiCrAl 合金を用いたピストンシリンダーを使用して 4 GPa 程度まで発生出来る様になりましたが、なかなか良い試料には巡り会えませんでした。しかし、名古屋工業大学の坂本功先生に頂いた、Ce<sub>2</sub>CoIn<sub>8</sub> という物質が、常圧で超伝導を示すことを突き止めました。当時、CeCoIn<sub>5</sub> が重い電子系超伝導物質であると報告され、多くの研究がなされている最中でした。この Ce<sub>2</sub>CoIn<sub>8</sub> はこの物質の派生物質であります。常圧での T<sub>c</sub> が 0.4K の超伝導物質であり、その電気抵抗の温度依存性とその磁場中の振る舞いを図 4 に示します[11]。

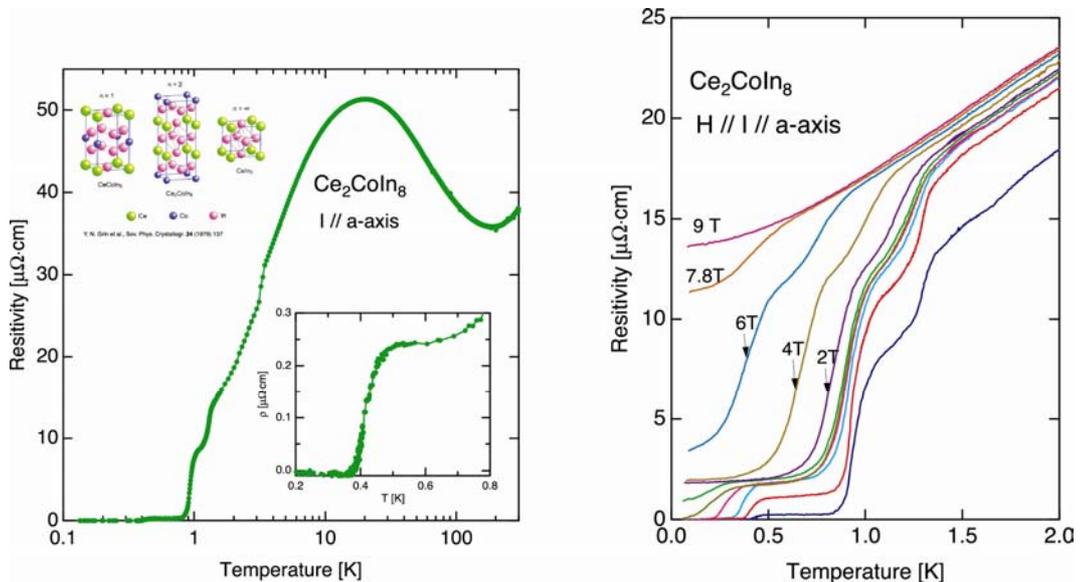


図4 Ce<sub>2</sub>CoIn<sub>8</sub>の電気抵抗率の温度依存とその磁場効果

立派な超伝導特性を示していますが、試料依存性が大きくなかなか再現性のある DATA が得られませんでした。残念ながら、いまだに超伝導の起源に迫る様な測定をする事は出来ていません。Co を Rh で置換した  $\text{Ce}_2\text{RhIn}_8$  も、圧力誘起超伝導体ですが、Co の系と同様に、試料依存性があり、詳細な物理を議論するまでには至りませんでした。重い電子系物質の研究における試料の重要性を認識させられました。当時  $\text{CeRhIn}_5$  等の物質で圧力誘起超伝導がいくつか報告されましたがその出現する圧力は、2 – 3 GPa であり、丁度超伝導が出現するところまでしか、研究が出来ない状態でした。これらの物質の物性の全容(超伝導消失まで)を研究すべく、低温まで冷却可能な小型装置である、ダイヤモンドアンビルセルやブリッジマンアンビルセルの導入を行いました。ダイヤモンドアンビルセルは、外国人客員教授として在籍されていた S. Tozer 氏との共同研究により、栗田伸之さんと狩野みかさんにその技術を磨いてもらいました。努力の甲斐あり、ダイヤモンドアンビルセルを用い 15 GPa 程度までの静水圧下で研究を行うことが可能となりました。この装置を用いた研究により、2 人とも無事博士号を取得することが出来ました。主査および副査の先生方には本当にお世話になりました。改めて御礼申し上げます。ブリッジマンアンビルセルの方は、高澤直裕さん、山本英明さんを中心に行いました。より大きな試料空間を求めた圧力装置の開発であり、再現性良く 10 GPa 程度の圧力を発生させることは出来ませんでした。この両者は、対向アンビル式の圧力装置ですが、この方式だとどうしても圧力媒体が固化してしまうと、静水圧性が悪くなり、DATA の信用性が無くなってしまい、物理を議論するには難しい点が出てきます。この静水圧性を維持しながらより高い圧力を発生させる装置として、キュービックアンビルセルの小型化を行いました。この装置の小型化は以前からのアイデアでしたが、2005 年 10 月 29-31 日に室蘭工業大学で行われた、第 46 回高圧討論会(実行委員長、城谷一民先生)で、住友重機械テクノフォート株式会社の田度正史さん、高木克啓さんと話が出来たのが切っ掛けとなり実現に向けて動き出しました。忘れがたい討論会の一つです。幸い科研費を頂くことが出来ていたため、小枝真仁さんを中心に開発を進め、小林広貴さん、山田篤人さん、久田旭彦さんと受け継がれています。

ダイヤモンドアンビルセルと希釈冷凍機を組み合わせた成果として、充填スクッテルダイト化合物の研究があります。充填スクッテルダイト化合物  $RT_4X_{12}$  ( $R = \text{希土類等}$ ;  $T = \text{Fe, Ru, Os}$ ;  $X = \text{P, As, Sb}$ ) は、組成元素の組み合わせにより、重い電子系超伝導や多極子秩序、半導体等、様々な異常物性を示します。これらの物性の重要な役割を果たしていると考えられている  $c-f$  混成の大きさを圧力で系統的に制御する事を目的とした研究です。 $\text{CeRu}_4\text{Sb}_{12}$  の圧力誘起金属-半導体転移、 $T_c = 1.8 \text{ K}$  の超伝導物質  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  の超伝導が、9.8 GPa においてもその超伝導転移が消失しない事、さらに、常圧で観測された磁場誘起秩序層(FIOP)が 7.0 GPa 以上では消失することを明らかにする事が出来ました[12]。しかしながら、この物質群においてもなかなか超伝導体の発見には至りませんでした。日々得られる新しい物性現象をみんなで楽しんでいました。

## Yb 系化合物

上述の様に、新たに開発したピストンシリンダーセルと希釈冷凍機を組み合わせることにより、圧力範囲 4 GPa 程度、温度範囲 35mK 程度までの環境下で、 $\text{CeRhIn}_5$ 、 $\text{Ce}_2\text{RhIn}_8$ 、 $\text{Ce}_2\text{CoIn}_8$  をはじめとした Ce 化合物の高圧力下電気抵抗測定を中心に測定しましたが、新しい興味深い研究成果を得るまでには至りませんでした。少し、おもしろい結果としては価数転移で知られている  $\text{YbInCu}_4$  におけるフィラメンタリーながら圧力誘起超伝導を発見することが出来た点です。なかなか超伝導を再現できず苦しんでいますが、高い静水圧性と圧力のチューニングが出来れば超伝導出現することを信じ、図 5 に電気抵抗の温度依存と、相図を示しておきます。ゼロ抵抗こそ観測されていませんが、磁場効果も測定されています[13]。

2006 年、助手の辺土正人さんが琉球大学理学部に准教授として栄転され、翌年の 2007 年 4 月に松林和幸さんに助教として赴任していただきました。Ce 化合物の研究は多くの研究室でなされ試料依存性の問題もあることから、 $\text{YbInCu}_4$  に次ぐ、Yb 化合物の研究をはじめようかと考えていた最中に、APS ミーティングにおいて、 $\text{YbCo}_2\text{Zn}_{20}$  およびその関連物質の発表を聞く機会に巡り会いました。Yb 化合物においては、その蒸気圧が高いために純良な試料を得ることが難しいことや圧力誘起磁気秩序を示す臨界圧力が高く、実験的な困難さがとれない、研究が進んでいない物質群の一つであります。しかしながらこの物質は、比較的純良な試料が育成されており、常圧において 20 mK の低温まで磁気秩序を示さず、非常に大きな電子比熱係数( $\gamma \sim 8 \text{ J/mole K}^2$ )を示す物質でした。この  $\text{YbCo}_2\text{Zn}_{20}$  に着目し、帰国後、才賀裕太さんを中心に、試料作成をはじめ、研究をスタートさせました。幸い、比較的大きな単結晶を作成することができました。ピストンシリンダーセルを用いた研究により、この物質が 1 GPa 程度の低い圧力で磁気秩序を示すことを明らかにすること

が出来ました[14]。図 6 に各圧力下での比熱の温度依存性およびその圧力相図を示します。この臨界圧力はこれまで知られている圧力誘起磁気秩序を示す Yb 系化合物の中で最も小さく、量子臨界現象を研究する上で格好の対象物質であります。臨界圧力に試料依存性が若干ありますが、概ね 1.6 GPa 以下ですべての試料で磁気秩序が観測されます。

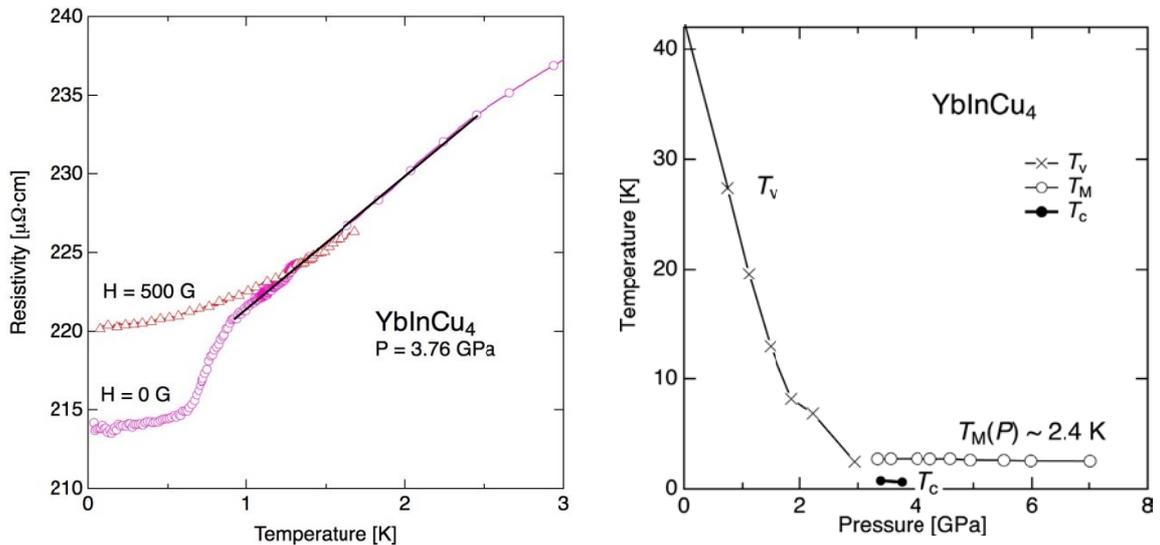


図 5 YbInCu<sub>4</sub> の 3.76 GPa の電気抵抗の温度依存とその圧力相図

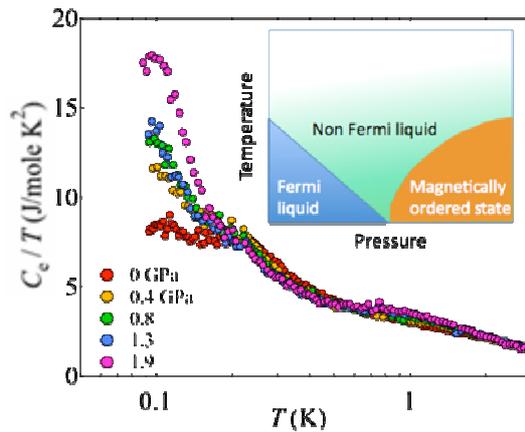


図 6 YbCo<sub>2</sub>Zn<sub>20</sub> の各圧力下における比熱の温度依存性とその相図

現在、松林和幸さん、山中里奈さんを中心にこの物質の磁場中高圧下比熱の研究を進めています。この圧力で誘起される磁気秩序は、中性子回折実験でも観測され、長距離反強磁性磁気秩序が出現し、また高圧下比熱測定では臨界圧力近傍において非フェルミ流体的な比熱の温度依存性を観測しています。さらに、Co を他の遷移金属で置換した YbIr<sub>2</sub>Zn<sub>20</sub>、YbRh<sub>2</sub>Zn<sub>20</sub> についても系統的な研究を行い、近藤効果に対応するエネルギースケールと磁気秩序相が出現する臨界圧力との間に相関があることを見いだしました[15]。

## 5. 鉄系超伝導体母物質に対する高い静水圧環境下での圧力効果

2008 年に、鉄系超伝導 LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub> が東工大の研究グループによって報告されました。純良な単結晶試料の育成が可能である 122 鉄系物質 AFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (A = Ba, Sr, Eu)に着目しその高圧下物性の研究を行っています。122 系母物質に化学置換や圧力を印加すると、鉄に由来した構造・反強磁性転移は抑制されて超伝導が現れるが、その圧力効果に関しては圧力誘起超伝導を示す臨界圧力が各研究グループによって異なることや超伝導のバルク性を調べた実験がなく、圧力相図に関して統一的な理解が得られていない状態でした。122 系の本質的な振る舞いを見極めるために高い静水圧性を有するキ

キュービックアンビル圧力発生装置を用いた高圧下物性測定をスタートさせました。試料は物性研の大串研也先生に良質単結晶を提供いただきました。

SrFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 圧力下における電気抵抗の温度依存性を図 7 に示します。常圧において  $T_S \sim 200$  K に見られる、構造・反強磁性転移による電気抵抗の異常は、加圧により低温へと抑制され、5 GPa 以上になると構造・反強磁性転移は消失し、 $T_{SC} \sim 32$  K のシャープな圧力誘起超伝導転移が観測された。同じ圧力領域での交流磁化率測定を行い、高圧下で誘起される超伝導の完全反磁性、すなわち、そのバルク性を初めて実験的に検証する事が出来ました。

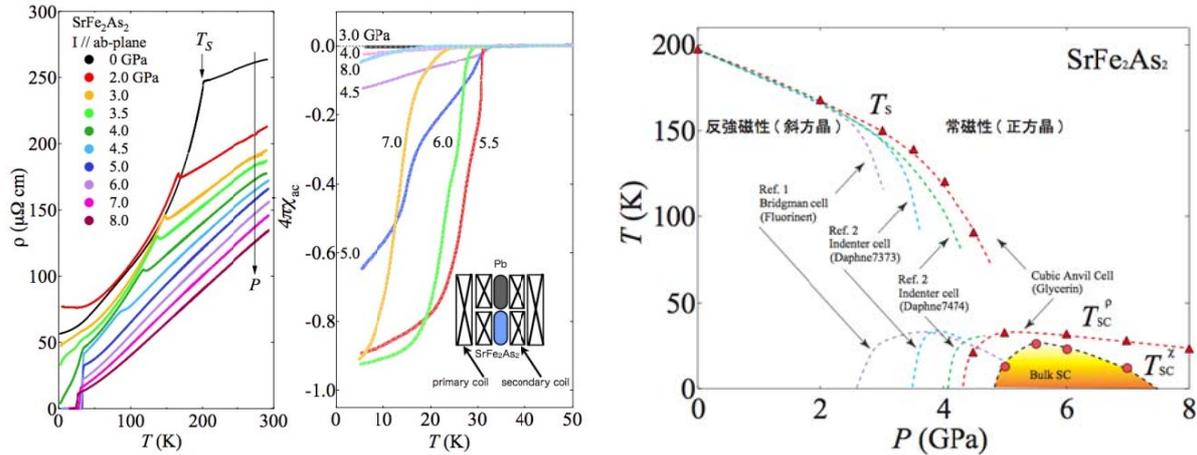


図 7 SrFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> の各圧力下における電気抵抗および ac 磁化の温度依存性とその相図

上述の結果とこれまでの高圧実験結果が図 7 の温度-圧力相図に示されています。図には、本研究によるキュービックアンビルセル(3 軸方向から等方的に加圧される装置)を用いた実験結果と、他の研究グループの報告(いずれも 1 軸加圧の対向アンビル型の圧力装置が用いられた)を比較してプロットしてあります。その結果、液体圧力媒体が固化する圧力以上において、構造・反強磁性転移温度の圧力効果に顕著な違いがあることが明らかとなりました。また、過去に報告された実験結果ではいずれも単結晶試料が用いられており、さらに加圧軸が圧力セル中で試料の *c* 軸方向と一致していたため、 $T_S$  の圧力効果に極めて大きな軸性圧力効果があることが明らかとなりました[16]。

その他、同じ 122 系に属する EuFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> に関しては、圧力誘起超伝導と Eu の磁気秩序状態との競合に起因したリエントラントな振る舞い、さらに高圧域で起こる、Eu の磁気秩序状態と価数の変化を直接的に観測し、包括的な相図の作成に成功しました[17]。

現在は、瀧川研の研究者北川健太郎さんとの共同研究で 111 系 AFeAs(A = Li, Na)に対して、セルフフラックス法によって化学量論比に近い純良単結晶試料の育成に成功し、その超伝導特性と圧力効果についての研究を継続しています。

## 6. 圧力装置の開発

最後に、研究室のもっとも得意とする圧力装置の開発について少し紹介します。上述されている様に、物性研究所着任当初は、キュービックアンビルセル、ピストンシリンダーセル、ブリッジマンアンビルセル、希釈冷凍機、超伝導磁石等が使用可能でした。極低温での測定を目指していましたので、まず、ピストンシリンダーセルと希釈冷凍機の組み合わせによる研究を主として進めました。この研究は、着任以前の 1999 年頃から松本武彦先生と共同研究していた NiCrAl 合金を用いたハイブリッド式圧力セルの最適化を引き続き行い、最終的には室温で 4 GPa 程度の圧力を発生することに成功しました[18]。圧力装置の開発は、破壊実験の繰り返しですので、時として実りの無い実験を繰り返すことになるのですが、我慢強く開発を行った、栗田伸之さん、小枝真仁さん、小山(現：中澤)和子さん、山本英明さん、小林広貴さんに感謝します。図 8 に二層式ピストンシリンダー型圧力装置の概念図を示します。現在、誰でも簡便に、3 GPa 程度の圧力下での実験が出来る様になっています。

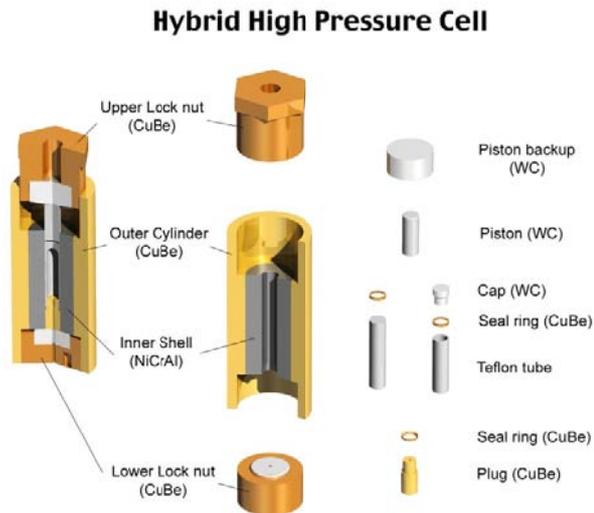


図 8 二層式ピストンシリンダー型圧力発生装置の模式図。作図者：辺土正人

次に 3 GPa 以上の高圧下・極低温下における物性測定を行うために開発した、ダイヤモンドアンビル圧力装置(DAC)を図 9 に示します。

この装置は、既存 DAC 装置には多くの調整機構部品があり、圧力発生部に比べて装置が大きくなります。本装置は調整機構をすべて取り除き、機械加工精度を頼りに、装置サイズの大幅な小型化(6.4 mmφ×6.7 mm)に成功しました。その結果、市販の PPMS(<sup>3</sup>He) 装置を用いた 10 GPa 級高圧下電気抵抗率測定や、冷凍機中での装置回転による磁場中角度依存測定が可能となっています。この装置はその試料加圧容積は、0.3 mmφ x 0.05 mm 程度と極端に小さく、試料セットもさることながら、静水圧性を保ちながら加圧し、様々な物性を精密に測定することは難しい。しかし、現在では、ピストンシリンダーやキュービックアンビル圧力発生装置と同レベルの静水圧下での電気抵抗測定を圧力範囲 10 GPa 程度での極低温での測定が可能となっています。難点は、装置が人を選んでしまうことです。このため DAC は、器用な人のみが扱うことが出来る特別な装置と言えるでしょう。しかし、セットさえ出来れば、ピストンシリンダー圧力装置同様、磁場中での測定も容易に可能であり、20 T までの磁気抵抗効果および磁化測定等が可能になっています。

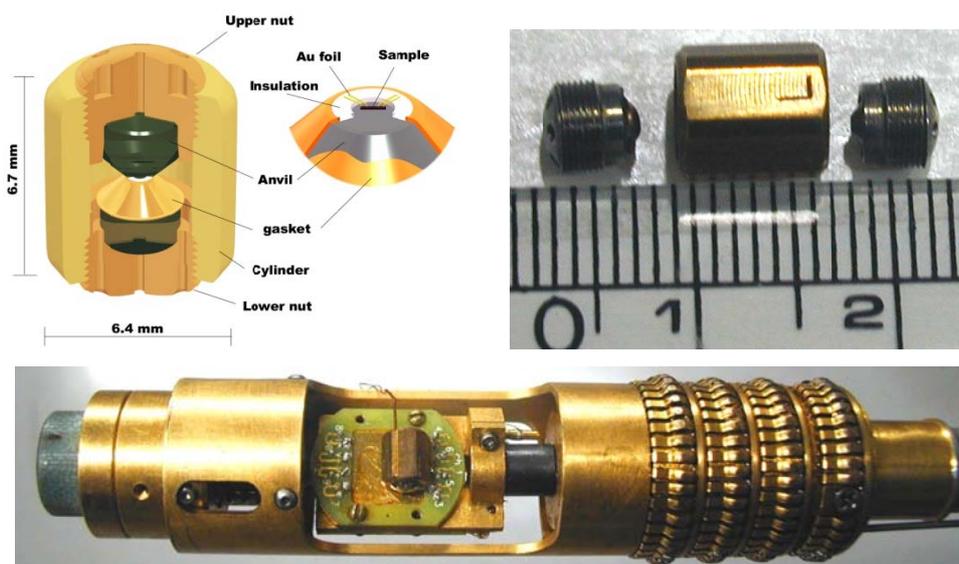


図 9 小型 DAC の模式図と写真。写真(下)は DAC が PPMS の <sup>3</sup>He オプションに搭載されている様子

物性研究において比熱測定は、欠かすことの出来ない研究手段の一つであります。研究室では、梅原出先生に協力頂き小型のピストンシリンダーセルを用いた装置開発を行いました。図 10 に CuBe 合金を用いた比熱測定セルを示します。本装置と希釈冷凍機を組み合わせ、1.5 GPa、100 mK までの測定が可能となっています。また、本装置の特徴として、MPMS 磁化測定装置を用いた磁化測定がそのままの状態で行えるため、同じ圧力環境下での比熱と磁化の同時測定が可能となっている[19]。

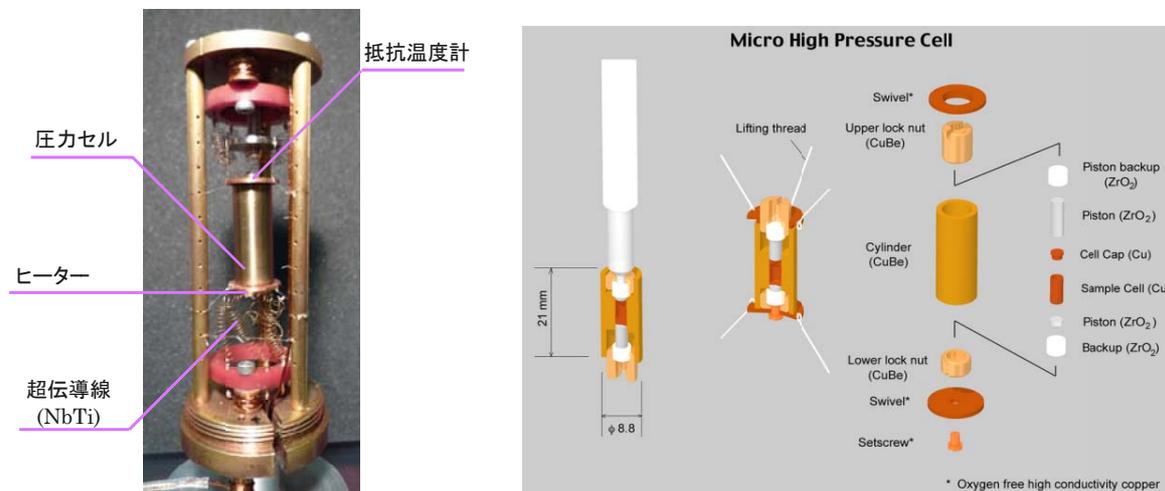


図 10 CuBe 合金を用いた比熱測定用圧力発生装置の写真とその模式図

キュービックアンビル圧力発生装置は、物性研共同利用を通じて最も多くの研究者に使用されている装置です。高圧下での静水圧性も良く、10 GPa 程度においても高精度な物性測定が可能である事は上述の測定例を参考にして頂ければ容易に理解出来ると思います。アンビルの材質に依存しますが、現在 PCBN アンビルを用い 11 GPa 程度、2 K 程度までの測定範囲で電気抵抗や AC 帯磁率の測定が可能です。しかし、本装置を用いた極低温での研究は現状では不可能です。そこで本装置の、試料セットの簡便さ、静水圧性の良さをそのままに、 $^3\text{He}$  冷凍機温度まで冷却可能な、パームキュービックアンビルセルの開発を行いました。その結果、大きさは従来の 10 分の 1 以下(10 kg 以下)の装置の開発に成功しました。本装置の詳細は物理学会誌を読んで頂ければ幸いです[20]。セルの概念図およびパームキュービックアンビルセルをトッピング式  $^3\text{He}$  冷凍機のプロブおよび希釈冷凍機に取り付けた写真を図 11 に示しておきます。本装置と  $^3\text{He}$  冷凍機を組み合わせ、8 GPa、450 mK、5 T までの測定が可能となっています。

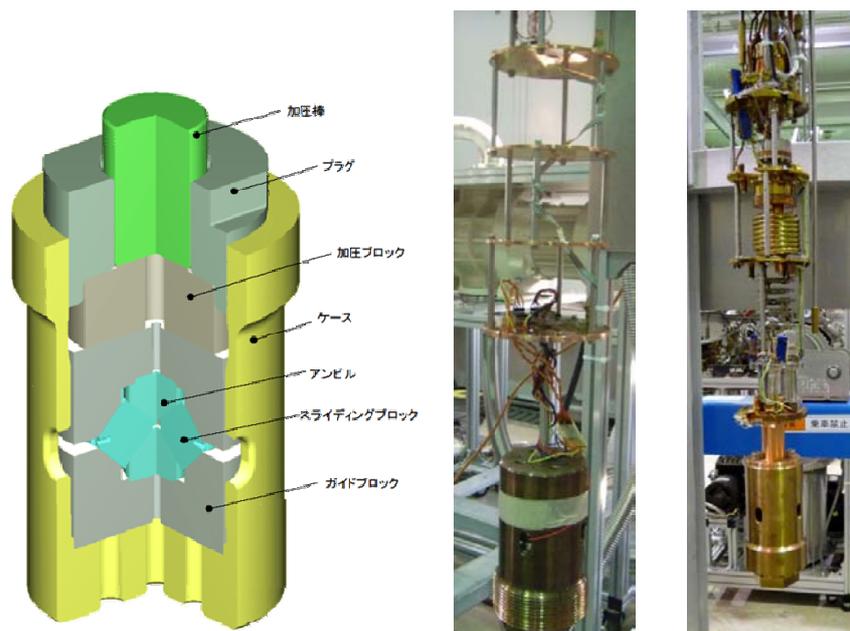


図 11 パームキュービックアンビルセルの概念図と装置をトッピング式  $^3\text{He}$  冷凍機のプロブおよび希釈冷凍機に取り付けた様子

## 7. 最後に

以上、これまでの研究室を概観してきた。まだまだ書き尽くせないところが多々有り、研究室に携わった人たちからは文句が出そうですがご勘弁ください。こうして振り返ってみると、実に多くの人の協力のもとで、研究が行われて来たか思い知らされます。今後も、物性研本来の使命である、共同利用を主体とし、さらに独自の研究を展開していこうと思います。

改めて、研究室を支えて頂いた、スタッフ、学生、および秘書の加藤(現：藤原)真里子さん、川畑絵美さん、また、共同利用および囑託の先生方、皆さんに感謝して終わりにしたいと思います。

## 参考文献

- [1] T. Adachi, E. Ojima, B. Narymbetov, H. Kobayashi, T. Miyazaki and M. Tokumoto: *Chem. Lett.* (2000) 406.
- [2] H. Taniguchi, M. Miyashita, K. Uchiyama, K. Satoh, N. Mori, H. Okamoto, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Hedo and Y. Uwatoko, *J. Phys.Soc. Jpn*, **72**, 468 (2003).
- [3] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault and K. Bechgaard: *J. Phys. Lett.* 41L95 (1980).
- [4] *Organic Super-conductors*: T. Ishiguro, K. Yamaji, G. Saito. Springer (1998).  
*Organic Conductors*, Editor : S. Kagoshima, K. Kanoda, T. Mori, *J. Phys.Soc. Jpn*, **75**, (2005).
- [5] D. Jérôme: *Science* **252** (1991) 1509.
- [6] T. Adachi, E. Ojima, K. Kato, H. Kobayashi, T. Miyazaki, M. Tokumoto and A. Kobayashi: *J. Am. Chem. Soc.* **122** (2000) 3238.
- [7] M. Itoi, M. Kano, N. Kurita, M. Hedo, Y. Uwatoko, T. Nakamura. *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** 053703 (2007)
- [8] M. Kano Doctoral thesis (2008)
- [9] M. Itoi, C. Araki, M. Hedo, Y. Uwatoko, T. Nakamura: *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 023701 (2008).  
荒木千恵子、上床美也、糸井充穂、辺土正人、中村敏和、*固体物理* **43**, No. 7, 409-418 (2008).
- [10] F. Iwase et al. *Journal of Physics : Conference Series* **215** 012063 (2010).  
F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa, and T. Nakamura : *Phys. Rev. B* **84**, 115140 (2011)
- [11] G. Chen, S. Ohara, M. Hedo, Y. Uwatoko, K. Saito, M. Sorai, I. Sakamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **71** 2836 (2002).  
M. Hedo, N. Kurita, Y. Uwatoko, G. Chen, S. Ohara and I. Sakamoto, *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276** 146 (2004).
- [12] N. Kurita, M. Hedo, M. Koeda, M. Kobayashi, H. Sato, H. Sugawara and Y. Uwatoko, *Phys. Rev. B* **79**, 014441 (2009).  
N. Kurita, M. Hedo, M. Kano, T. Fujiwara, Y. Uwatoko and S. W. Tozer, *J. Magn. Magn. Mat.* **310**, 611 (2007).
- [13] N. Kurita, M. Kano, M. Hedo, Y. Uwatoko, J. L. Sarrao, J. D. Thompson and S. W. Tozer, *Physica B* **378**, 104 (2006).  
M. Hedo, Y. Uwatoko, T. Matsumoto, J.L. Sarrao and J. Thompson, *Acta Physica Polonica B* **34**, 1193 (2003).
- [14] Y. Saiga, K. Matsubayashi, T. Fujiwara, M. Kosaka, S. Katano, M. Hedo, T. Matsumoto and Y. Uwatoko, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 053710, (2008).  
Y. Nakanishi, T. Fujino, K. Ito, M. Nakamura, M. Yoshizawa, Y. Saiga, M. Kosaka and Y. Uwatoko, *Phys. Rev. B* **80**, 184418 (2009).
- [15] K. Matsubayashi, Y. Saiga, T. Matsumoto and Y. Uwatoko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **150**, 042117 (2009).  
K. Matsubayashi, Y. Saiga, T. Matsumoto and Y. Uwatoko, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 012112 (2010).
- [16] K. Matsubayashi, N. Katayama, K. Ohgushi, A. Yamada, K. Munakata, T. Matsumoto and Y. Uwatoko, *J. Phys. Soc. Jpn* **78**, 073706 (2009).
- [17] K. Matsubayashi, K. Munakata, M. Isobe, N. Katayama, K. Ohgushi, Y. Ueda, N. Kawamura, M. Mizumaki, N. Ishimatsu, M. Hedo, I. Umehara, and Y. Uwatoko, *Phys. Rev. B* **84**, 024502 (2011).
- [18] 上床美也、辺土正人、栗田伸之、小枝真仁、小坂昌史、松本武彦、*固体物理* **38**, 286 (2003).  
Y. Uwatoko, M. Hedo, N. Kurita, M. Koeda, M. Abliz and T. Matsumoto, *Physica B* **329**, 1658 (2003).
- [19] Y. Uwatoko, T. Fujiwara, M. Hedo, F. Tomioka, I. Umehara, *J. Phys. Cond. Mat.* **17**, S1011, (2005).
- [20] 松林和幸、松本武彦、上床美也、辺土正人 *日本物理学会誌* **66**(6), 423 (2011).

## 物性研究所短期研究会

# エネルギー変換の物性科学

日時：2011年11月14日(月)～11月16日(水)

場所：物性研究所本館6階 第1会議室(A636)

世話人：松本吉泰（京大院理）、平本昌宏（分子研）、工藤昭彦（東京理科大）、松尾豊（東大院理）  
秋山英文、小森文夫、杉野修、田島裕之、森初果、山室修、吉信淳、リップマー・ミック（東大物性研）

2011年11月14日から16日まで物性研究所の第一会議室において、物性研究所・短期研究会「エネルギー変換の物性科学」が開催された。

本研究会は東日本大震災直後に企画された。再生可能エネルギーの有効利用、すなわち太陽、地球、月などを源とする光、熱、風、地熱、潮汐などの自然エネルギーを電気や化学物質などに変換することが、より求められる状況となってきた。すでに実用化されている太陽電池はもとより、人工光合成、光触媒、熱電素子などが物質科学の分野では活発に研究されている。例えば、光によって水から水素と酸素を作り出す光触媒では、半導体における光励起（電子正孔対生成）、電荷の移動と分離、遷移金属助触媒表面における還元反応などの過程が含まれており、トータルシステムとして機能する。これらは、光物性・金属半導体界面・表面化学・電気化学など物性科学の諸分野と密接に関係している。エネルギー変換デバイスでは素過程の複合化とパラメータの最適化が成功の鍵を握っているが、素過程でさえ未解明の部分が多く、空間スケール・時間スケールでの理解が不可欠である。そこで、本短期研究会では、光から電気、光から物質、熱から電気、物質から電気などエネルギー変換に関わる物質と過程について現状を概観したのち、克服すべき課題の整理を行い、複合物性をトータルシステムとして機能させるために異なる分野間の連携強化を目的とした。

11月14日は71名、15日は85名、16日は56名で、3日間でのべ212名の参加者があった。興味深い講演と、参加者を含めた活発な討論に、主催者として感謝したい。



<11月16日の研究会風景>

2011 後期短期研究会「エネルギー変換の物性科学」プログラム

2011/11/14 (月)

12:55-13:00 吉信 淳 物性研 はじめに

**セッション1 人工光合成、生物発光など**

13:00-13:30 瀬川 浩司 東大 光エネルギー変換機能システムー太陽電池への展開  
 13:30-13:50 橋本 秀樹 大阪市大 光合成初期反応のナノ空間光機能制御  
 13:50-14:10 神取 秀樹 名工大 レチナル蛋白質およびフラビン蛋白質の光応答  
 14:10-14:30 平野 誉 電通大 高効率な生物・化学発光の分子メカニズム  
 14:30-14:50 秋山 英文 物性研 ホタル生物発光の定量計測と吸収蛍光分光

**セッション2 水分解光触媒など**

15:10-15:40 工藤 昭彦 東理大 ソーラー水分解による水素製造のための光触媒材料の開発  
 15:40-16:00 M. Lippmaa 物性研 Photocatalytic activity of valence-controlled Rh:SrTiO<sub>3</sub> thin films  
 16:00-16:20 梅澤 直人 物材機構 光触媒材料の理論的設計  
 16:20-16:40 溝川 貴司 東大 Strongly-correlated MgTi<sub>2</sub>O<sub>4</sub> for hydrogen generator  
 16:40-17:00 松本 祐司 東工大 UHV-電気化学複合装置を用いた酸化物半導体単結晶・薄膜電極の研究  
 17:00-17:20 守友 浩 筑波大 ポリマー型正極材料とその先にあるもの

\*\*\*\*\*

2011/11/15 (火)

**セッション3 太陽電池A**

10:00-10:30 平本 昌宏 分子研 有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス  
 10:30-10:50 但馬 敬介 東大 自己組織化による有機薄膜太陽電池のナノ構造制御  
 10:50-11:10 大北 英生 京大 高分子太陽電池のキャリアダイナミクス  
 11:10-11:30 韓 礼元 物材機構 色素増感太陽電池の高効率化研究  
 11:30-11:50 館山 佳尚 物材機構 固液界面反応に向けた第一原理計算解析：色素増感太陽電池を中心に

**セッション4 太陽電池B**

13:00-13:30 松尾 豊 東大 有機薄膜太陽電池におけるマテリアルデザイン  
 13:30-13:50 宮寺 哲彦 産総研 単結晶を用いた有機太陽電池  
 13:50-14:10 田島 裕之 物性研 バルクヘテロ接合におけるキャリア輸送の研究  
 14:10-14:30 宮本 良之 産総研 電子正孔生成分離過程の第一原理計算

**セッション5 強相関系(熱電変換、力光変換)など**

14:50-15:20 寺崎 一郎 名大 熱電変換の物性物理  
 15:20-15:40 徐 超男 産総研 応力発光材料の開発  
 15:40-16:00 高際 良樹/木村 薫 東大 13族-遷移金属の擬ギャップ・狭ギャップ系熱電材料  
 16:00-16:20 有田 亮太郎 東大 強相関第一原理計算による熱電材料の設計  
 16:20-16:40 川崎 雅司 東大 強相関酸化物の光誘起相転移を用いた太陽電池の可能性  
 16:40-17:00 柴山 充弘 物性研 燃料電池電極用触媒インクの小角中性子散乱

\*\*\*\*\*

2011/11/16 (水)

**セッション6 水素が関わる物性科学**

9:30-10:00	北川 宏	京大	金属ナノ粒子におけるプロトニクス
10:00-10:20	山室 修	物性研	中性子で観た多孔性配位高分子におけるプロトンダイナミクス
10:20-10:40	原田 慈久	東大	軟 X 線吸収・発光による大気圧分光の現状と可能性
10:40-11:00	Markus Wilde	東大生研	金属表面における水素吸収の機構
11:00-11:20	森 初果	物性研	プロトン-電子相関系機能性有機物質の開拓
11:20-11:40	阿波賀 邦夫	名大	界面電気二重層を利用したエネルギー・情報変換
11:40-12:00	杉野 修	物性研	白金表面の第一原理シミュレーション

**セッション7 エネルギー変換の物性科学**

13:00-13:30	福住 俊一	阪大	人工光合成によるエネルギー変換及び貯蔵
13:30-13:50	松本 吉泰	京大	可視光応答光触媒における電荷、および格子ダイナミクス
13:50-14:10	上野 和紀	東大	電場誘起による電解液/酸化物界面を用いた新規超伝導体の開発
14:10-14:30	大西 洋	神大	ドーブ光触媒キャリアダイナミクスの分光計測

**特別講演**

14:30-15:00	深井 有	東大生研	エネルギー問題の大枠を考える
15:00-15:10	松本 吉泰	京大	おわりに

**光エネルギー変換機能システムー太陽電池への展開**

瀬川 浩司 (東京大学 先端科学技術研究センター)

再生可能エネルギーの利用拡大に向けて、わが国では太陽光発電が中心的な役割を担うものとして期待されている。2010 年末には太陽光発電パネルが設置された住宅が 85 万戸を超え、総設置容量で約 350 万 kWp に達したと推定される。しかしながら、それでもまだ太陽光発電による発電量は日本の総電力需要の 0.3%を超えたに過ぎない。さらに飛躍的に太陽光発電の導入拡大を進めるためには、太陽電池の低コスト化が不可欠である。このため、次世代型太陽電池として大幅な発電コストの低減が期待される有機系太陽電池が注目されている。なかでも、「光合成型太陽電池」とも呼ばれる色素の光誘起電子移動過程を用いた「色素増感太陽電池」の研究開発は着実に進んでおり、デザインを重視したインテリアになる太陽電池や、屋外用高耐久性モジュールも作成されている。その性能は、サブモジュールの光電変換効率で 9.9%、屋外耐久性は 15 年以上と着実に性能が上がってきた。これらの本格的実用化に向けては、光電変換効率や耐久性などをさらに改善する必要があり、可視から近赤外領域に吸収を示す新しい分子の開発などが必要である。本講演では、光エネルギー変換機能分子システムから発展した太陽電池について、いくつかのトピックスを紹介する。

**<参考文献>**

- [1] B. O'Regan and M. Graetzel, *Nature*, **353**, 737 (1991).
- [2] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, and W. Warta, *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, **17**, 320(2009).

## 光合成初期反応のナノ空間光機能制御

橋本 秀樹 (大阪市立大学・複合先端研究機構、CREST/JST)

本研究は、紅色光合成細菌の光合成初期過程における高効率な光エネルギー変換機構の解明を目的として行った。この機構を担うのは、光合成膜中に存在する直径 5~10 ナノメートルのリング構造を持つ、色素蛋白超分子複合体である。我々はこれまでに、色素の構造を人為的に改変した人工の色素蛋白超分子複合体の創成と単結晶 X 線構造解析による原子スケールでの構造決定[1]や、10 フェムト秒を切る世界最速クラス、且つ物性研究に耐えうるレベルの安定性を有する超高速時間分解レーザー分光計測の確立と適用により、色素蛋白超分子複体内における光合成反応の極初期過程の実時間計測を達成してきた[2]。本研究では、様々に構造を改変した人工の色素蛋白超分子複合体を創成し[3]、これらを脂質二重層膜及び基板上に自在に配列させた人工光合成膜(基板)を創成している[4]。その膜内における色素蛋白超分子複体の配列様式を高分解能原子間力顕微鏡によるその場観察で確認しながら、超高速時間分解分光計測による励起エネルギー移動の実時間計測を行い、統括的な励起エネルギー移動機構の解明を目指している。

### <参考文献>

- [1] *Structure* **12** (2004) 765.
- [2] *Science* **298** (2002) 2395.; *PRL* **93** (2004) 163002.; *PRL* **95** (2005) 213601.; *Biophys. J.* **90** (2006) 2486.; *PRB* **75** (2007) 155110.; *PRB* **77** (2008) 205118.; *PRB* **80** (2009) 035118.; *PRB* **81** (2010) 245112.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 1097.
- [3] *J. Phys. Chem. B* **112** (2008) 9467.
- [4] *Photosynth. Res.* **95** (2008) 327.; *Langmuir* **27** (2011) 1092.

## レチナール蛋白質およびフラビン蛋白質の光応答

神取 秀樹 (名古屋工業大学)

生物は光を情報やエネルギー源として巧みに利用する。レチナールは 7 回膜貫通の蛋白質に結合し、異性化反応という共通の機構で光エネルギーを取り込み、我々の視覚やバクテリアの走光性、光駆動イオンポンプといった様々な機能を実現する。最近のトピックスとして、光駆動性のイオンチャネルを光操作のツールとして脳神経科学に応用しようという Optogenetics の登場が挙げられる。

フラビンは蛋白質に結合し、酸化還元反応を触媒する酵素としてはたらくが、そのうちのあるものは光エネルギーを積極的に利用する。フラビンを発光源として利用するのが細菌のルシフェラーゼであり、フラビンを吸収分子として利用するのがクリプトクロム・DNA 光回復酵素ファミリーなどの青色光受容体である。この蛋白質群は実に興味深く、植物・細菌にあっては光センサーとしてはたらく一方、ヒトでは生物時計の部品となり、渡り鳥にあっては磁気センサーとなる上、紫外線で損傷を受けた DNA を光を使って修復することもできるのだ。フラビン蛋白質の多様な光反応メカニズムは、光生物学における最近のトピックスとなっている。

### <参考となる総説>

- [1] 神取秀樹「タンパク質分子ポンプのダイナミズム」日本物理学会誌 **56**, 75-82 (2001).
- [2] 神取秀樹「ロドプシンの分子科学」*Mol. Sci.* **5**, A0043 (2011).
- [2] 神取秀樹「光といのち」を化学する、化学と工業、11月号印刷中 (2011).
- [3] H. Kandori, "Protein-Controlled Ultrafast Photoisomerization in Rhodopsin and Bacteriorhodopsin" in "Supramolecular Photochemistry: Controlling Photochemical Processes" edited by V. Ramamurthy & Y. Inoue, WILEY, pp. 571-596 (2011).
- [4] T. Iwata, S. Tokutomi and H. Kandori, "Light-induced structural changes of the LOV2 domains in various phototropins revealed by FTIR spectroscopy" *BIOPHYSICS*, in press (2011).

## 高効率な生物・化学発光の分子メカニズム

平野 誉 (電気通信大学先進理工学専攻)

発光生物に学ぶ人工的な高性能化学発光系を構築するため、我々は基礎となる反応機構の解明を進めている[1]。ホタルやウミホタルなどの発光生物は望みの色で効率良く、精密に反応制御して光る。優れた特徴のうち高効率性を支配する化学励起の反応機構は、省資源化のためにも重要な研究課題である。我々が注目するウミホタルの生物発光も高効率( $\phi$  30%)であり、この反応機構を検討した。具体的に発光基質(ルシフェリン)はイミダゾピラジノン環の母骨格を持つため、この骨格に置換基を系統的に導入した誘導体を用いて、化学発光を生物発光反応モデルとして解析を行った。この結果、ルシフェリンの $\pi$ 共役置換基(インドリル基)が電子供与基として高効率化に働くことが解った[2]。特に高エネルギー中間体から励起分子を生成する化学励起において、遷移状態と励起分子が高い分子内電荷移動(ICT)性を持つことが効率向上に重要であると推察される。現状では化学発光は生物発光より効率が低下する問題点があり、化学励起には置換基の電子的効果のみならず酵素による配座制御の効果も重要と考えられる。ICT 性遷移状態を経る化学励起の反応機構は理論化学研究からも提案されている[3]。さらに、高効率発光を示すホタルの生物発光やジオキセタン誘導体の化学発光との比較を行いながら、化学励起機構について紹介する。

### <参考文献>

- [1] 平野 誉, *光化学 (光化学協会誌)* **2007**, *38*, 111.
- [2] Hirano, T. et al., *Photochem. Photobiol. Sci.* **2008**, *7*, 197.
- [3] Isobe, H.; Yamaguchi K.; et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 8667.

## ホタル生物発光の定量計測と吸収蛍光分光

秋山 英文、王 瑜、早水 裕平、安東 頼子 (東京大学物性研究所)

ホタル生物発光は、ルシフェリン分子が酵素たんぱく質ルシフェラーゼの中で酸化反応によりオキシルシフェリンに変わり、その反応エネルギーの一部が光として放出されるものである。これらの物質を ATP や Mg と共に調整して水溶液中で反応させれば、試験管内でホタル生物発光が再現できる。ホタル生物発光の発光量子収率は非常に高く、ルシフェラーゼの構造や溶液の pH によって発光色が変化する。これらの事は 50 年以上前から知られており、これらを活かしたバイオテクノロジー応用も盛んである。しかし、その現象を説明する統一的機構・モデルは未だ得られていない。

我々は、その解明を目指して、生物発光の絶対発光量を定量的に計測できる分光計測装置を開発し、この装置を用いてホタル生物発光の効率(量子収率)と色の成分(スペクトル)を定量計測した。さらに、反応過程のモニタリングと、ルシフェラーゼタンパク質中のオキシルシフェリンの状態解明のため、反応中および反応後溶液の吸収蛍光分光を行った。

その結果、生物発光量子収率の値は  $41.0 \pm 7.4\%$ ( $k=1$ )であり、定説の 88%を大きく下回った[1,2]。色変化について、定量発光スペクトルでは、緑色発光の強度だけが赤色発光と独立に増減して全体としての色変化を起こしていることを示唆する結果が得られた[1,2]。タンパク質中オキシルシフェリンの吸収蛍光スペクトルは pH に対して緩やかな依存性を示し、生物発光スペクトルの pH 依存性とは異なっていることが解った。

### <参考文献>

- [1] Y. Ando, et al., *Nature Photonics* **2**, 44-47 (2008).
- [2] 秋山英文、安東頼子、王瑜、現代化学 **473**, 21-25 (2010).

## ソーラー水分解による水素製造のための光触媒材料の開発

工藤 昭彦 (東京理科大学理学部)

エネルギー・環境問題の観点から、太陽光エネルギーを使った水素などの燃料を合成する技術が強く望まれている。その解決策として光触媒を用いた水の分解反応が注目されている。この反応は、光を化学エネルギーに変換することから人工光合成と呼ばれている。われわれは、独自のドーピング、元素置換、固溶体形成などのバンドエンジニアリングやクリスタルエンジニアリングにより、新たな光触媒材料を開発してきた。これらの材料を用いて、粉末光触媒や半導体光電極による可視光水分解が可能となった。

### <参考文献>

- [1] A. Kudo and Y. Miseki, "Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting," *Chem. Soc. Rev.*, **2009**, *38* [1], 253.
- [2] K. Iwashina and A. Kudo, "Rh-Doped SrTiO<sub>3</sub> Photocatalyst Electrode Showing Cathodic Photocurrent for Water Splitting under Visible-Light Irradiation", *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 13272.

### Photocatalytic activity of valence-controlled Rh:SrTiO<sub>3</sub> thin films

M. Lippmaa, S. Kawasaki, R. Takahashi, K. Nakatsuji, J. Yoshinobu, F. Komori  
(Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Chiba 277-8581, Japan)  
A. Kudo (Faculty of Science, Tokyo University of science, Tokyo 162-1861, Japan)

Photocatalytic splitting of water offers a way to use sunlight to produce hydrogen or other synthetic fuels from water. Among various photocatalytic materials, oxides have the advantage of good chemical stability and high catalytic activity, but generally suffer from low energy capture efficiency due to the wide bandgap and low carrier lifetimes.[1] The purpose of this work is to explore one of the few visible-light catalytic titanates, Rh-doped SrTiO<sub>3</sub>, in order to determine the electronic state of the Rh dopant and the location of the Rh impurity levels in the 3.2 eV bandgap of SrTiO<sub>3</sub>. We have used high-crystallinity thin film samples for core-level analysis by XPS in order to correlate the crystal growth parameters with the Rh valence in the films. We have shown that stable Rh<sup>4+</sup> and Rh<sup>3+</sup> states can be achieved by a suitable selection of oxygen and Sr stoichiometry during crystal growth. Cyclic voltammetry measurements under visible light illumination showed that the catalytic energy conversion efficiency of the Rh:SrTiO<sub>3</sub> thin films was nearly an order of magnitude higher than in equivalent powder catalyst samples.[2]

### <References>

- [1] A. Kudo and Y. Miseki, *Chem. Soc. Rev.* **38**, 253 (2009).
- [2] K. Iwashina and A. Kudo, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 13272 (2011).

## 光触媒材料の理論的設計

梅澤 直人 (物質・材料研究機構、科学技術新興機構 さきがけ)

近年、光触媒は環境・エネルギー問題の解決に大きく貢献できる材料として注目されている[1]。本研究では、リン酸銀( $\text{Ag}_3\text{PO}_4$ )の高い光触媒酸化力[2,3]を更に引き出すため、特定の面方位を露呈する方法を検討した[4]。触媒活性は表面エネルギーと深い関係がある。一般に、表面エネルギーの大きい面は不安定であるため触媒活性が高い。 $\text{Ag}_3\text{PO}_4$ の場合、(110)面と(100)面の表面エネルギーはそれぞれ、 $1.31\text{J/m}^2$  及び  $1.12\text{J/m}^2$  であることが、我々の計算から明らかとなった。実際、(110)面を露呈した rhombic dodecahedron 結晶は、(100)面を表面にもつ cube よりも光触媒活性が高いことが実験的に確認された。また、それぞれの面に対して酸素欠損を導入した場合の表面エネルギーを計算し、理想表面との安定性の比較から、(110)面では比較的酸素欠損が出来やすい事が理論的に示唆された。

光触媒ナノ粒子を凝集することでバンド構造を改変し、新しいタイプの可視光応答型光触媒の開発を試みた[4,5]。二つの表面を向かい合わせた単純なモデルで CdS ナノ粒子間の表面接触を表現し、凝集の効果を理論的に調べた。我々の計算から、接触界面では硫黄原子が抜けやすく、Cd・Cd 結合が形成されることがわかった。また、Cd・Cd 結合軌道がギャップ中に形成され、バンドギャップが実効的に小さくなることも理解された。実際、CdS ナノ粒子を凝集することで、可視光照射下での光触媒活性が高くなる事が実験的に確認されており、本モデルの正当性が示された[5]。また、 $\text{TiO}_2$ 凝集ナノ粒子でも同様の効果が観測され、可視光照射下で高い光触媒活性を示すことが明らかとなった[6]。

### <参考文献>

- [1] Hua Tong, Shuxin Ouyang, Yingpu Bi, Naoto Umezawa, Mitsutake Oshikiri, and Jinhua Ye, *Advanced Materials* DOI: 10.1002/adma.201102752
- [2] Z. Yi, J. Ye, N. Kikugawa, T. Kako, S. Ouyang, H. S. Williams, H. Yang, J. Cao, W. Luo, Z. Li, Y. Liu, and R. L. Withers, *Nature Materials*, **9**, 559 (2010).
- [3] Naoto Umezawa, Shuxin Ouyang, and Jinhua Ye, *Phys. Rev. B* **83**, 035202 (2011).
- [4] Yingpu Bi, Shuxin Ouyang, Naoto Umezawa, Junyu Cao, and Jinhua Ye, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 6490 (2011).
- [5] Hua Tong, Naoto Umezawa, Jinhua Ye, and Takahisa Ohno, *Energy & Environmental Sci.* **4**, 1684 (2011).
- [6] Hua Tong, Naoto Umezawa, and Jinhua Ye, *Chem. Commun.* **47**, 4219 (2011).

## Strongly-correlated $\text{MgTi}_2\text{O}_4$ for hydrogen generator

Takashi Mizokawa (Graduate School of Frontier Sciences, University of Tokyo)

Mott insulators in transition-metal oxides are classified into (i) Mott-Hubbard type insulators where Mott gap  $E_G$  is mainly determined by the Coulomb interaction  $U$  between the transition-metal  $d$  electrons and (ii) charge-transfer type insulators where  $E_G$  is determined by the charge-transfer energy  $\Delta$  from the oxygen  $2p$  state to the transition-metal  $d$  state (Zaanen-Sawatzky-Allen scheme). The rich electronic properties of such Mott insulators are deeply related to the spin-charge-orbital degrees of freedom of transition-metal  $d$  states as well as the oxygen  $2p$  states. In the present talk, we would like to focus on a spinel-type transition-metal oxide  $\text{MgTi}_2\text{O}_4$  where an exotic electronic state is realized due to the Ti  $3d$  orbital degeneracy [1,2]. An interesting interplay between the bulk  $\text{Ti}^{3+}$  state and the surface  $\text{Ti}^{4+}$  state has been found using photoemission spectroscopy and x-ray absorption spectroscopy. In addition, we have studied hydrogen generation by the  $\text{MgTi}_2\text{O}_4$  surface which seems to be related to the complicated electronic state realized in the interface between the  $\text{Ti}^{3+}$  and  $\text{Ti}^{4+}$  regions. We will discuss potential application of  $\text{MgTi}_2\text{O}_4$  as a hydrogen generator for fuel cells.

The present work has been done in collaboration with Y. Ishige, Y. Fujiwara, T. Sasaki, M. Isobe, Y. Ueda, T. Z. Regier, H. Wadati, and G. A. Sawatzky.

#### <参考文献>

- [1] M. Isobe and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1848 (2002).
- [2] D. I. Khomskii and T. Mizokawa, Phys. Rev. Lett. **94**, 156402 (2005).

## UHV-電気化学複合装置を用いた酸化物半導体単結晶・薄膜電極の研究

松本 祐司 (東京工業大学応用セラミックス研究所)

酸化物半導体は、二酸化チタンに代表される光触媒を始め、トランジスタや発光素子、太陽電池、熱電変換など、様々なエレクトロニクス、エネルギー変換材料として期待されている。そのための薄膜化技術は、高温超伝導の発見を契機に、パルスレーザー堆積(PLD)法を中心とした様々な薄膜作製法が成熟期にある[1]。今や、精密設計に基づく、これら薄膜・デバイスの酸化物固有の課題に対する分野横断的な理解への重要性が急速に高まっている。伝統的ではあるが、酸化物半導体における“酸素不定比性”もその課題の1つである。酸素不定比性は、半導体バルク中のドナー、アクセプター密度だけでなく、酸素欠陥を介した接合界面での電流特性にまで大きな影響を及ぼす。光触媒も例外ではなく、総じてナノスケールの酸化物半導体薄膜・デバイスでは、こうした酸素不定比性の空間的制御もますます重要となりつつある。

本研究では、表面科学の分野で確立されている UHV-電気化学の手法[2]を取り入れた電気化学-PLD 複合装置を開発し、酸化物半導体単結晶・薄膜の酸素不定比性の課題に取り組む。電気化学的手法では、容量測定による不純物濃度の定量評価[3]に電極付けが不要なこと、電極反応を介した表面・界面の高感度な特性評価が可能なことを特長とする。

研究会では、電気化学-PLD 複合装置を用いて得られた TiO<sub>2</sub> 薄膜成長過程における酸素欠損生成の kinetics、および Au/TiO<sub>2</sub> 接合界面での電流特性について紹介し、酸素不定比性の制御の重要性について議論する。

#### <参考文献>

- [1] International Workshop on Oxide Electronics (WOE)
- [2] M. Taniguchi, E. Kuzembaev, K. Tanaka, Surf. Sci. **290**, L711 (1993).
- [3] J. Hilibrand, R. D. Gold, RCA Rev. **21**, 245 (1960).

## ポリマー型正極材料とその先にあるもの

守友 浩 (筑波大学大学院数理物質科学研究科、学際物質科学研究センター)

リチウムイオン電池技術は、間違いなく我々の社会を支えている技術基盤であり、その重要性はますます高まりつつある。産業上のターゲットは自動車搭載用または家庭蓄電用の大容量蓄電池であるが、小型蓄電池も高速化、薄膜化、軽量化といった技術革新が日々なされている。

リチウムイオン電池の正極材は LiCoO<sub>2</sub> 等の遷移金属酸化物系が精力的に開発されてきた。我々は、ネットワークポリマーであるプルシャンブルー類似体に着目し研究を行ってきた。最近、リチウム電池用の薄膜型電極を作成し、高い容量(128mAh/g)と高いサイクル特性(100 サイクル後に初期値の 87%)の実現に成功した。この薄膜型電極を利用することにより、電池の残量を色で表示する『カラー電池』が可能となる。我々の薄膜電極は、バインダーや導電助剤なしに動作するので、リチウムイオン電池の精密科学を展開することが可能となる。

本講演では、我々の薄膜型電極の物性と電池特性を概説するとともに、単なる蓄電技術を超えたリチウムイオン電池技術(固体中にリチウムイオンの出入りを制御する技術)の利用法(例えば、リチウムイオンメモリ)を提案する。

### <参考文献>

- [1] T. Matsuda and Y. Moritomo, *Appl. Phys. Express*, **4**, 047101 (2011).
- [2] Y. Kurihara and Y. Moritomo, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **50**, 060210 (2011)
- [3] Y. Moritomo and T. Shibata, *Appl. Phys. Lett.*, **94** 043502 (3 pages) (2009)

## 有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス

平本 昌宏 (分子科学研究所)

本研究は、イレブンナイン超高純度化、ドーピングによる pn 制御、内蔵電界形成、オーミック接合形成、半導体パラメータ精密評価、などのサイエンスをシリコン無機半導体のレベルまで引き上げることによって、高効率の有機薄膜太陽電池を目指している。

今回は、(1) MoO<sub>3</sub> ドーピングによる C<sub>60</sub> の p 型化[1]、(2) pn ホモ接合を有する単独 C<sub>60</sub> 薄膜セル[2]、(3) 共蒸着膜の pn 制御[3]、(4) 共蒸発分子導入によるナノ構造制御[4]、などの最近の成果について述べる。

### <参考文献>

- [1] M. Kubo, K. Iketaki, T. Kaji, M. Hiramoto, *Appl. Phys. Lett.*, **98**, 073311 (2011).
- [2] M. Kubo, T. Kaji, M. Hiramoto, *AIP Advances*, **1**, 032177 (2011).
- [3] N. Ishiyama, M. Kubo, T. Kaji, M. Hiramoto, *Appl. Phys. Lett.*, **99**, 133301 (2011).
- [4] T. Kaji, M. Zhang, S. Nakao, K. Iketaki, K. Yokoyama, C. W. Tang, M. Hiramoto, *Adv. Mater.*, **23**, 3320 (2011).

## 自己組織化による有機薄膜太陽電池のナノ構造制御

但馬 敬介 (東京大学大学院工学系研究科)

有機薄膜太陽電池の更なる効率化のためには、電荷分離および輸送性能を大きく左右する薄膜中のナノ構造を、再現性良く精密に制御する必要がある。本研究では、ポリマーデザインによる自己組織化によって、薄膜太陽電池中のナノ構造を制御することを目的としている。方法論として、ブロックコポリマーによる自発的マイクロ相分離構造の形成を用いた。互いに相溶性の低いブロックからなるブロックコポリマーでは、数十 nm スケールの安定な相分離構造を形成する。これを用いることで、薄膜中でのホールと電子の輸送経路を分離することが可能になると期待した。ポリチオフェンの精密合成と、側鎖にフラーレンをクリックケミストリーで効率よく連結することによって、アクセプターが片方のブロックに含まれるブロックコポリマーを得た。またフラーレン連結ランダムコポリマーも同様の手法で合成した。得られたポリマーで単一成分によるデバイスを作製し、その性能及び熱安定性について検討した。その結果、ブロックコポリマーを用いたデバイスは、ランダムコポリマーよりも高い効率を示した。またデバイス性能の高い熱安定性が示された。これは、混合薄膜中で起こる 2 成分の大きな相分離が抑制されたためであると考えられ、熱安定性に優れた材料設計の指針となりうると考えられる。

### <参考文献>

- [1] Y. Zhang, K. Tajima, K. Hirota, K. Hashimoto, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 7812.
- [2] Y. Zhang, K. Tajima, K. Hashimoto, *Macromolecules* **2009**, 42, 7008.
- [3] Y. Zhang, K. Tajima, K. Hashimoto, *Synth. Met.*, **2011**, 161, 225.
- [4] S. Miyanishi, Y. Zhang, K. Tajima and K. Hashimoto, *Chem. Commun.*, **2010**, 46, 6723-6725.

## 高分子太陽電池のキャリアダイナミクス

大北 英生 (京大院工・JST さきがけ)

本研究は、高分子太陽電池におけるキャリア生成および再結合ダイナミクスの解明を目的として行った。Poly(3-hexylthiophene) (P3HT)とフラーレン誘導体(PCBM)のブレンド膜の過渡吸収分光測定を行った結果、100 fs 以内の高速なキャリア生成と数十 ps のやや遅れたキャリア生成機構が存在することが分かった。前者は P3HT/PCBM 界面近傍に生成した励起子からの電荷生成に、後者は P3HT ドメイン内に生成した励起子の P3HT/PCBM 界面への拡散に続く電荷生成にそれぞれ帰属した。およそ 10%の励起子は界面に到達せずに失活するものの、界面での電荷分離の収率はほぼ 100%であり、フリーキャリアへ解離する収率も 90%にもおよぶことが分かった。さらに、フリーキャリアの二分子再結合ダイナミクスを検討した結果、トラップフリーのキャリアとトラップされたキャリアが存在することが分かった。興味深いことに、いずれの再結合速度もランジュバン再結合速度よりも遅い値を示し、キャリア寿命は 10  $\mu$ s におよぶことが分かった。この値は、電荷回収時間よりも長いことから、効率よく電荷回収されていることがキャリアダイナミクスの観点から実証された。

### <参考文献>

- [1] H. Ohkita, S. Ito, *Polymer*, **52**, 4397 (2011).
- [2] J. Guo, H. Ohkita, S. Yokoya, H. Benten, S. Ito, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 9631 (2010).
- [3] J. Guo, H. Ohkita, H. Benten, S. Ito, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 6154 (2010).
- [4] J. Guo, H. Ohkita, H. Benten, S. Ito, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 16869 (2009).

## 色素増感太陽電池の高効率化研究

韓 礼元 (独立行政法人物質・材料研究機構)

地球規模での環境・エネルギー問題がクローズアップされる中で、再生可能なエネルギーのひとつである太陽光発電が注目を集めている。シリコン太陽電池は既に商品化されているが、その発電コストは従来型のエネルギー源と比較して高いという欠点を持つ。一方、酸化チタン( $\text{TiO}_2$ )、増感色素、ヨウ素系電解質など、資源的な制約が少ない廉価な材料で構成される色素増感太陽電池(DSC)は、高温・高真空プロセスを必要とせず、大量生産に適した構造であることから生産コストを大幅に下げることが可能を有している。しかし、DSC はシリコン太陽電池に比べ、エネルギー変換効率が低いのが現状である。変換効率を向上するには DSC における電荷分離、電荷輸送などの物理的なメカニズムの解明が重要である。本研究では DSC に等価回路モデルの導入や固液界面における色素分子の配列制御などにより達成された高効率化の研究などを中心に紹介する。

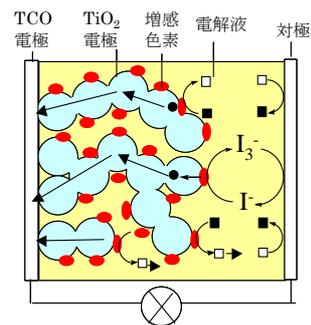


図1 色素増感太陽電池の構造と動作原理

### <参考文献>

- [1] N. Koide, A. Islam, Y. Chiba, L. Han, *J. Photochem. Photobio A Chemistry* 182(2006)296.
- [2] Y. Chiba, A. Islam, Y. Watanabe, R. Komiya, N. Koide, L. Han, *Japanese J. Appl. Phys.* 45(2006)L638.

## 固液界面反応に向けた第一原理計算解析：色素増感太陽電池を中心に

館山 佳尚 TATEYAMA Yoshitaka (物材機構 WPI-MANA ナノシステム計算科学 G)

エネルギー・環境問題の観点から色素増感太陽電池(DSC)・光触媒(PC)等が注目されて久しい。これらの問題に対し、“従来の静的かつ近似要素の多い第一原理計算”を利用して貢献しようという試みは数多くある。しかしこれらの主要反応場は固液界面であり、この界面反応に対する原子・電子スケール描像の確立なくして、真の理解はあり得ないと考えられる。

そのような観点のもと、私たちは固液界面反応解析に必要となる第一原理計算技術(特に統計サンプリング)の確立に重点を置きながら、代表的な DSC・PC 界面である  $\text{TiO}_2/\text{MeCN}$  系[1]、 $\text{TiO}_2/\text{H}_2\text{O}$  系[2]の第一原理サンプリング解析の開拓を進めてきた。DSC 系では、製造過程での混入が不可避な電解質溶液(MeCN)中の水分子についての解析も行い、その存在状態および DSC の耐久性に対する影響について明らかにした。

また  $\text{TiO}_2$ /色素/電解質溶液系への展開を目指し、色素吸着状態に関する理論解析[3]も現在進めている。この解析では  $\text{TiO}_2$  への色素吸着の際に色素のカルボキシル基のプロトンが色素にとどまっている方が安定であるという従来とは異なる結果が得られた。このプロトン位置は界面電子状態に影響を与えることから、DSC の効率向上に対して新たな知見を与える物となっている。

### <参考文献>

- [1] M. Sumita, K. Sodeyama, L. Han, Y. Tateyama, *J. Phys. Chem. C* **115**, 19849-19855 (2011).
- [2] M. Sumita, C. Hu, Y. Tateyama, *J. Phys. Chem. C* **114**, 18529-18537 (2010).
- [3] K. Sodeyama, M. Sumita, L. Han, Y. Tateyama *et al. in preparation.*

## 有機薄膜太陽電池におけるマテリアルデザイン

松尾 豊 (東京大学大学院理学系研究科)

有機薄膜太陽電池は軽量で意匠性が高く、塗布プロセスにより安価に作られることが期待され、注目されている。最近では自然エネルギー利用の観点からも注目され、有機薄膜太陽電池の光電エネルギー変換効率は 10%に達している。そして世界中で研究開発がますます盛んになっている。有機薄膜太陽電池では 2 種類の有機半導体、すなわち有機電子供与体と有機電子受容体を用いるが、本講演ではそれら材料開発の研究トレンド、光電変換機構から考えられる分子設計指針、および我々が取り組んでいる研究について解説する。電流を低下させないで高電圧を与えるフラレン誘導体、長波長光吸収が可能な低分子電子供与体(テトラセン誘導体)、等について詳説し、有機合成化学から有機薄膜太陽電池へのアプローチを紹介したい。

### <参考文献>

- [1] Y. Matsuo, Y. Sato, T. Niinomi, I. Soga, H. Tanaka, E. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 16048–16050.
- [2] Y. Zhang, Y. Matsuo, C.-Z. Li, H. Tanaka, E. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 6890–6893.
- [3] T. Okamoto, K. Nakahara, A. Saeki, S. Seki, J. H. Oh, H. B. Akkerman, Z. Bao, Y. Matsuo, *Chem. Mater.* **2011**, *23*, 1646–1649.
- [4] T. Okamoto, T. Suzuki, S. Kojima, Y. Matsuo, *Chem. Lett.* **2011**, *40*, 739–741.

## 単結晶を用いた有機太陽電池

宮寺 哲彦<sup>1,2</sup>、大橋 昇<sup>2</sup>、當摩 哲也<sup>2,1</sup>、山成 敏広<sup>2</sup>、吉田 郵司<sup>2</sup>  
(<sup>1</sup>科学技術振興機構 さきがけ、<sup>2</sup>産業技術総合研究所)

有機薄膜太陽電池の性能を支配する要因として薄膜内での励起子拡散が重要となる。有機薄膜内での励起子拡散長( $L_D$ )は数十 nm と報告されているが<sup>1</sup>、その短い  $L_D$  に対してこれまで、ランダムな p/n 界面を作製することで効率よく電荷を取り出すバルクヘテロジャンクション構造が開拓されてきた。一方で  $L_D$  自体を増大させる試みは開拓途上である<sup>2</sup>。本研究では構造欠陥やトラップの少ない有機単結晶を用いて  $L_D$  を増大させ、入射太陽光をより効率よく電気エネルギーに変換することを試みた。

ルブレンやテトラセンの単結晶を p 型半導体として用いて p/n 構造(n 型層は C<sub>60</sub>)の有機太陽電池を作製し、数百 nm の厚膜を用いても太陽電池として動作することを確認した。励起子拡散モデルを用いて分光感度特性(IPCE)のシミュレーション<sup>3</sup>を行った。実験で得られた IPCE との比較から、テトラセン単結晶において  $L_D \sim 170$  nm が得られた。また、テトラセン単結晶の蛍光分光の結果からも、同様に 170 nm 近い  $L_D$  が得られることが分かった。実験結果から単結晶化による  $L_D$  の増大と素子の厚膜化が可能であることが分かったため、シミュレーションを用いて光電変換効率を計算したところ、種々の材料で  $L_D$  の増大により特性が向上することが分かった。

### <参考文献>

- [1] B. P. Rand et. al., Prog. Photovolt: Res. Appl. **15**, (2007) 659.
- [2] H. Najafov et al., Nature Mat. 2010, **9**, 938.
- [3] L. A. A. Pettersson, et. al., J. Appl. Phys. **86**, 487 (1999).

## バルクヘテロ接合におけるキャリア輸送の研究

田島 裕之 (東京大学物性研究所)

バルクヘテロ接合は、2 種類の有機半導体を混合して混ぜ合わせたブレンド型有機半導体の総称である。バルクヘテロ接合においては、有機半導体界面に有効な電場ができており、この界面で光生成した励起子が解離するとされている。本研究においては、光生成したキャリアの輸送特性に興味を持って、室温から 1.3 K に至る広い温度範囲で、光 CELIV(carrier extraction by linearly increasing voltage)法の実験を行った。

光 CELIV 法では、光キャリアを生成したのちに電場 Sweep を行い、変位電流と同時に光生成したキャリアを抽出する。トラップを考慮しない単純なモデルでは、CELIV シグナルのピークは mobility と対応しており、電流-時間プロットで、電圧上昇速度( $A$ )を増すとピークは  $A^{-1/2}$  になるように左にシフトする。また同じデータを電流-電圧プロットすると、 $A^{1/2}$  になるように右にシフトする。広い温度範囲で測定した結果、この関係は室温付近では成立するものの、極低温においては、電流-電圧プロットにおいて光 CELIV シグナルのピークはほとんど電圧上昇速度( $A$ )に依存しないことが分かった。このことは、光 CELIV に対する解釈を根底から変える必要があることを示唆している。講演においては、プルーレンケルモデルを用いたわれわれの解釈について述べる[1]。

### <参考文献>

- [1] H. Tajima and M. Yasui, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 063705.

## 電子正孔生成分離過程の第一原理計算

宮本 良之 (産業技術総合研究所ナノシステム研究部門)

本研究は、材料における光起電現象解明と高効率化の研究を加速するために、第一原理計算手法の開発を行うものである。太陽電池材料では、光励起による電子・正孔生成効率と、生成された電子と正孔の分離効率の高さが必要である。しかし、通常これらの要求はトレードオフの関係にあり効率は予測しにくく、第一原理計算による材料設計が重要になる。第一原理計算では、材料内の光吸収から電子・正孔分離の一連のプロセスがダイナミカルに取り扱われなくてはならない。

本講演では、上記の視点に立って基礎的な計算方法の見直しを提唱する。電子・正孔分離をする材料はそもそも電子の基底状態においても材料に内部電界がかかった状態である。光励起により電子・正孔対が生成された場合、電子と正孔の波動関数は定常状態ではなく内部電界の存在によってそれぞれ反対の方向に広がるように時間発展する。その様子を時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算によりシミュレーションすることが可能であることを、SiC 極性表面[1]、有機分子のドナー・アクセプターペア[2]の事例で紹介したい。計算では残念なことに境界条件が必要なので、電流の発生 の代わりに分極の増大という形で光起電現象をみることになる。

### <参考文献>

[1] Y. Miyamoto, APEX **3**, 047202 (2010).

[2] M. Yoon, Y. Miyamoto, and M. Scheffler, New J. Phys. **13**, 073039 (2011).

## 熱電変換の物性物理

寺崎 一郎 (名古屋大学理学研究科)

真空中の電子が電荷と運動エネルギーを運ぶように、固体中の電子は電荷と熱を運ぶ。したがって固体の中の電流と熱流には交差相関が存在し、熱電効果と呼ばれる。1821年にゼーベックは、棒状試料に温度差をつけると温度差に比例した電圧、熱起電力が発生することを見いだした。これはゼーベック効果と呼ばれ、代表的な熱電効果の一つである。熱電変換とは、熱電効果を利用して熱と電気エネルギーを相互に変換する技術のことであり、その研究の歴史はゼーベックの発見以来 100 年を超える。しかし、最近のエネルギー・環境問題への関心の高まりから、その価値が見直され、世界中で精力的な研究が行われている。

熱電材料には、大きな熱起電力、低い電気抵抗率、低い熱伝導率が求められるが、この 3 つの輸送係数はキャリア濃度の関数であるため独立に制御できない。そのため、様々な努力が行われてきた。本講演では、近年の熱電材料の設計指針と成果について物性物理の立場から概観し、我々が取り組んでいる強相関電子系酸化物による熱電材料の物性を紹介する。

### <参考文献>

[1] 物理学者へのよい導入として、G. D. Mahan, Solid State Phys. **51**, (Academic Press, 1998).

[2] 日本セラミックス協会日本熱電学会(編), "熱電変換材料", (2005年、日刊工業新聞社).

[3] 寺崎一郎, 日本磁気学会誌 **5** (2010) 270-275.

## 応力発光材料の開発

徐 超男 XU Chao-Nan (独立行政法人産業技術総合研究所)

Mechanoluminescence (ML) materials emit light due to the application of mechanical stress. The ML responding to elastic deformation, plastic deformation and fracture is referred here as elastooluminescence, plasticoluminescence and fractoluminescence, the former two belong to non-destructive ML and the later belongs to destructive ML. Until now, no practice application of ML has been realized so far. Recently we have developed innovative elastic-luminescent (ESL) materials, each particle of which emits visible light repeatedly in response to stresses applied. When dispersedly coated on a structure, each particle acts as a sensitive mechanical sensor, while the 2-dimensional emission pattern of the whole assembly reflects well the dynamical stress distribution inside the structure. This provides a novel way of diagnosing the structural health, far more advantageous over the conventional point-by-point measurement method by use of a strain gage. It is possible to detect invisible defects and micro-cracks in small parts of machinery as well as to monitor the safety of huge constructions like bridges from shakes, damages and destruction. In this way, the use of innovative elastic-luminescence technology is about to cut open a way to novel structural health diagnosis.

### <参考文献>

- [1] Xu, C.N.: *Encycl. Smart Mater.* 1 (2002) 190-201.
- [2] Xu, C.N.: *Safety Management of Structures Using Elastic-luminescent Materials (in Japanese)*, OYO BUTURI, 80 (2011), 46-50.

## 13 族-遷移金属の擬ギャップ・狭ギャップ系熱電材料

高際 良樹、木村 薫 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)

熱電発電は、排熱から電気に直接変換する発電方法であり、省エネルギーに貢献できる技術である。しかし、現段階では変換効率の低さから幅広い民生利用には至っていない。実用化のためには、①高い変換効率を有し、②安全な元素からなり、かつ③コストが低い新規材料を見出すことである。

本研究では、高い変換効率を得るためにはどのような電子構造が望ましいのかを調査した結果、研究対象物質として、13 族(Al, Ga, In)と遷移金属(TM: Pd, Mn, Fe, Re, Ru)からなる擬ギャップ系及び狭ギャップ系固体を選定した。具体的には、前者は正 20 面体クラスター固体である Al-Pd-TM(TM: Mn, Re)系準結晶[1]、後者は RuAl<sub>2</sub>[2], RuGa<sub>2</sub>[2-4], RuIn<sub>3</sub>[4], RuGa<sub>3</sub>[5]に代表される 2 元系金属間化合物である。

Al 系準結晶に関しては、周期性を前提としたバンド計算を行うことが困難であるが、狭ギャップ系固体に関しては、バンド計算から予測される熱電物性との比較を行い、リジッドバンド的な描像で実験結果を説明できることを明らかにした[4,5]。

### <参考文献>

- [1] Y. Takagiwa, T. Kamimura, J. T. Okada, and K. Kimura, *J. Electron. Mater.* **39**, 1885(2010).
- [2] Y. Takagiwa, Y. Matsubayashi, A. Suzumura, J. T. Okada, and K. Kimura, *Mater. Trans.* **51**, 988(2010).
- [3] Y. Takagiwa, J. T. Okada, and K. Kimura, *J. Alloys Compd.* **507**, 364(2010).
- [4] Y. Takagiwa, K. Kitahara, Y. Matsubayashi, and K. Kimura, *Appl. Phys. Lett.* to be published.
- [5] Y. Takagiwa, K. Kitahara, Y. Matsubayashi, and K. Kimura, in preparation.

## 強相関第一原理計算による熱電材料の設計

有田 亮太郎（東京大学大学院工学系研究科/JST-PRESTO）

熱電材料の性能は熱電性能指数とよばれるパラメータの大小で評価される。この熱電性能指数は大きなゼーベック係数と電気伝導度、小さな熱伝導度において大きな値をとる。一般にゼーベック係数は金属で小さくなる傾向があるが、もし金属的な電気伝導と大きなゼーベック係数が共存すれば高性能熱伝導材料実現への可能性が開く。この観点から、金属でどこまでゼーベック係数を大きくできるかをいくつかの遷移金属化合物を念頭において強相関第一原理計算の方法を用いて考察した。

ゼーベック係数は、電子と正孔の寄与の足し合わせとして表現される。これらの寄与は逆の符号をもち、多くの金属ではおよそ相殺しあう。従って金属に大きなゼーベック係数を付与する指導原理として、電子状態にできるだけ電子正孔非対称性を導入することが考えられる。それにはバンド分散に非対称性を導入する（プリン型バンド分散）、自己エネルギーに非対称性を導入する、などの可能性がある。講演では、これらの可能性について具体的な計算結果をもとに議論を行う予定である。

### <参考文献>

- [1] K. Kuroki and R. Arita, J. Phys. Soc. Jpn., 76083707 (2007).
- [2] R. Arita et al., Phys. Rev. B, 78 115121 (2008).
- [3] T. Suzuki et al., Phys. Rev. B 83 035204 (2011).

## 強相関酸化物の光誘起相転移を用いた太陽電池の可能性

川崎 雅司（理研・基幹研・交差相関 G&強相関量子 G、東大・工・量子相せ&物工）

強相関酸化物では、絶縁体と金属状態が競合し光照射で容易に相転移を誘起できる。この際、強相関絶縁体をバンド絶縁体のアナロジーで考えると、ギャップに比べ高エネルギーの 1 光子あたり、多数の励起キャリアを生成すると考えることもできる（エネルギー保存則は満たす）。実際、pump-probe 実験や X 線照射で定量的に増幅効果を確認している[1]。また、このようなホットキャリアが緩和していく過程で、逆オージェ効果がどのように進展するか、スピン結合系での量子シミュレーションを行い、その必要条件を明らかにしてきた[2]。このキャリアを内部電界で分離できれば、高効率多重キャリア生成太陽電池の完成であるが、強相関電子系の界面物理は半導体のように簡単にはいかない。しかし、代表的なモット絶縁体のバンドラインアップを明らかにし、キャリアを生成する不純物濃度の定量や、強相関酸化物中での小数キャリア拡散や内部電界による空乏層からのドリフトを定量的に検出することに成功している[3]。講演では、強相関多重キャリア生成太陽電池の可能性について概観する[4]。

### <参考文献>

- [1] M. Matsubara et. al., Phys. Rev. B **77**, 094410(2008); K. Shibuya et. al., Phys. Rev. B, in press.
- [2] W. Koshibae et. al., Phys. Rev. Lett. **103**, 266402 (2009) ; W. Koshibae et. al., Euro. Phys. Lett. **94** , 27003 (2011)
- [3] M. Nakamura et. al., Phys. Rev. B **82**, 201101 (2010); J. Fujioka et. al., submitted
- [4] 日経エレクトロニクス 2011年10月17日号(予定)

## 燃料電池電極用触媒インクの小角中性子散乱

柴山 充弘<sup>1</sup>、草野 巧巳<sup>1</sup>、松永 拓郎<sup>1</sup>、雨宮 一樹<sup>2</sup>、小林 宣之<sup>2</sup>  
(東京大学物性研究所<sup>1</sup>、トヨタ自動車株式会社 FC 開発部<sup>2</sup>)

固体高分子形燃料電池(PEFC)は常温付近での操作が可能で、コンパクトでありながら高い電流出力があるため、自動車などへの応用が期待されている。PEFC の反応場となる電極(触媒層)は、白金などの触媒微粒子が担持されたカーボン粉と ionomer(イオン性高分子材料)が分散した溶液である「触媒インク」を塗布・乾燥させることで作製される。PEFC の性能は電極構造に強く依存することが分かっている。この電極構造は、構成材料由来や電極化工法で決定されるが、最近、電極の出発物質である触媒インクの構造の寄与が大きいことが分かってきた。我々は、触媒インクの微細構造の解明を目的としてコントラスト変調小角中性子散乱実験を行った。その結果、触媒インクは樹枝状に会合したカーボン担体粒子を ionomer 分子が取り囲んだ構造をとっていることが分かった。現在、触媒インク構造と電極構造の相関を明らかにし、PEFC を高性能化すべく検討を行っている。

### <参考文献>

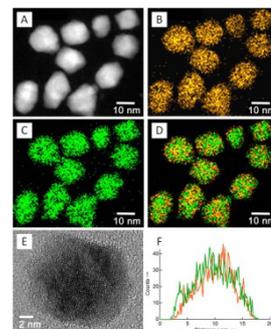
- [1] Kocha, S. S., Principles of MEA preparation, in “Handbook of Fuel Cells - Fundamentals, Technology and Applications”, W. Vielstich, H. A. Gasteiger, A. Lamm, Eds., John Wiley & Sons, NY (2003).
- [2] G. Gebel, O. Diat, O. *Fuel Cells* 5, 261-276 (2005).
- [3] M. Shibayama, et al, in preparation.

## 金属ナノ粒子におけるプロトニクス

北川 宏 (京都大学大学院理学研究科化学専攻)

水素は最も軽く量子波動性を有することから、電子の自由度(電子・正孔・ポーラロン・バイポーラロン・電子スピンなど)に加えて、水素の自由度(プロトン・プロチウム・ヒドリド・核スピンなど)が利用できれば、より自由度に富み柔軟性のある新しい融合技術「プロトエレクトロニクス」が誕生することになる。本講演では、ナノ金属格子中に存在する水素に関する我々の最新の研究を紹介する。

周期表において、Rh、Pd、Ag は順に並んでおり、全て fcc 構造を有する第 5 周期の遷移金属である。これら三金属の中で Pd のみが水素吸蔵特性を示す。III-V 半導体で見られるようなバンドフィリング効果を考えると、Ag( $4d^{10}5s^1$ )と Rh( $4d^85s^1$ )が 1 : 1 の金属組成比で原子レベルに混じり合った固溶体型構造を形成した場合、その合金は周期表で両元素の間に位置する Pd( $4d^{10}5s^0$ )に類似した電子状態をとることが期待される。Ag と Rh はほとんど全ての組成領域で相分離構造を示し、2000°C以上の液相でさえ分離してしまう。我々は非平衡合成法を用いて AgRh ナノ粒子を作製し、STEM-EDS 分析を行った結果、粒子全体にわたって両元素が均一に分布していることが確認された(図：黄 Ag 元素、緑 Rh 元素)。Ag : Rh = 50 : 50 の混合比率の時に、最大の水素吸蔵量を示すことを明らかにした。



### <参考文献>

J.Am.Chem.Soc.132,15896-15898(2010).

## 中性子で観た多孔性配位高分子におけるプロトンダイナミクス

山室 修 (東京大学物性研究所)

高性能のプロトン伝導体を開発することは、燃料電池などへの応用に向けて重要な課題である。最近、金属を適当な大きさの配位子が架橋して結晶内部に空孔を有する多孔性配位高分子が多数合成され、この内部に水分子が入り込んだプロトン伝導体が注目を集めている。多くの場合、プロトンは酸性の配位子から放出され、ナフィオン膜に相当する高いプロトン伝導度(0.01 S/cm 程度)を有するものもある。我々は、中性子が水素に対して非常に大きい散乱断面積をもつことを利用し、中性子散乱を用いてこれらの物質のプロトン伝導機構を研究している。これまでに研究したのは、ルベアン酸銅錯体 [1,2]、ピミダゾール錯体 [3]、シュウ酸架橋錯体などである。ルベアン酸銅錯体は 3 次元的につながる直方体の細孔をもつが、この細孔内で水が細孔壁に凝縮する相転移が見いだされた。チャンネル状細孔をもつピミダゾール錯体では、細孔内部で水が 1 次元的な氷(Water nanotube)に結晶化する。水に加えてアジピン酸とアンモニウムイオンが層間に入ったシュウ酸架橋錯体では、層間分子が結晶とは思えないほど低い活性化エネルギー(< 3 kJ/mol)で動いており、これが高いプロトン伝導に寄与している。これらの結果についての概要を話したい。

### <参考文献>

- [1] T. Yamada, et al., J. Phys. Chem. B, 114, 8405 (2010).
- [2] T. Yamada, et al., J. Phys. Chem. B, in press.
- [3] M. Tadokoro, et al., J. Phys. Chem. B, 114, 2091 (2010).

## 軟 X 線吸収・発光による大気圧分光

原田 慈久 (東大院工)

軟 X 線は電子との相互作用が極めて強く、元素に固有の結合エネルギーを持った内殻電子を共鳴励起することによる軟 X 線吸収と引き続き起こる軟 X 線発光の過程を利用して、元素ごとの価電子状態の情報を得ることができる。一方でその強い吸収断面積のために、大気圧下では気体でもミリメートルオーダーで急激に減衰してしまうため、通常は超高真空下に試料を置いて測定する。これが真空を必要としない硬 X 線分光との相違であり、ある意味で大きなデメリットにもなっている。

本講演では、固体表面や固液界面で起こる吸着や化学反応を電子状態レベルで理解するために、大気圧下の試料に対してこの軟 X 線吸収・発光分光を適用する実験的試みについて、以下の 2 つの例で紹介する。

1. 水をはじめとする液体の測定で得られる水素結合状態のマイクロ不均一性について
2. 大気圧下における水素、酸素等の分子吸着サイトの特定と反応機構の解明に向けた取り組み

### <参考文献>

- [1] L. J. P. Ament *et al.*, Rev. Mod. Phys. **83**, 705 (2011); 軟 X 線発光の最新レビュー論文
- [2] A. Nilsson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2847 (1997); 金属基板上分子吸着の電子状態観測
- [3] T. Tokushima *et al.*, Chem. Phys. Lett. **460**, 387 (2008)/ K. M. Lange *et al.* Angew. Chem. Int. Ed. (2011) DOI: 10.1002/anie.201104161; 水や溶液の軟 X 線発光による電子状態解析

## 金属表面における水素吸収の機構

Markus Wilde (東京大学生産技術研究所)

Hydrogen absorption in hydride forming metals is of paramount importance for hydrogen storage and hydrogenation catalysis. Despite its enormous industrial relevance and intense research on the adsorption process, the precise transition mechanism of hydrogen atoms between gas phase molecular  $H_2$ , dissociated H atoms on the surface, and H atoms dissolved in the bulk of metals is still poorly understood at the atomic scale. In order to elucidate the microscopic reaction coordinate for this reversible process, we performed a detailed investigation of the hydrogen ad-/absorption at palladium (100) and (110) single crystal surfaces, which present structurally well-characterized model systems. Our experiments uniquely combine thermal desorption spectroscopy (TDS), high-resolution hydrogen depth profiling via  $^1H(^{15}N, \alpha\gamma)^{12}C$  nuclear reaction analysis (NRA), low energy electron diffraction (LEED), and isotopic (H, D) labeling. We thereby achieve the unambiguous discrimination of surface-adsorbed hydrogen atoms from those absorbed in shallow subsurface and deeper bulk regions, respectively [1,2]. By characterizing isotope effects in the formation of the respective hydrogen species, their thermal stability against desorption or diffusion, their mutual isotopic exchange behavior, and their reactivity with co-adsorbed hydrocarbon molecules, we obtain unprecedented insight into the mechanism of surface penetration, near-surface hydride nucleation [3], and the catalytic activity of absorbed H species [3,4]. We further highlight the importance of interactions with gas phase  $H_2$  molecules that elicit the transition of pre-adsorbed H atoms into the bulk, which raises interesting questions regarding the energy dissipation in the combined adsorption/absorption process.

### <参考文献>

- [1] M. Wilde, M. Matsumoto, K. Fukutani, and T. Aruga, *Surf. Sci.* **382-385**, 346 (2001).
- [2] M. Wilde and K. Fukutani, *Phys. Rev. B* **78**, 115411 (2008).
- [3] S. Ohno, M. Wilde, and K. Fukutani, in preparation.
- [4] M. Wilde, K. Fukutani, W. Ludwig, B. Brandt, J.-H. Fischer, S. Schauer mann, H.-J. Freund, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 9289 (2008).

## プロトン-電子相関系機能性有機物質の開拓

森 初果 (東京大学物性研究所)

プロトンと電子の相関は、生物が好気呼吸を行うときの代謝系である電子伝達系で見られ、エネルギー変換において重要な役割を果たす。このような、生体内におけるプロトンと電子の連動現象を、機能性固体材料で実現することを目的としている。

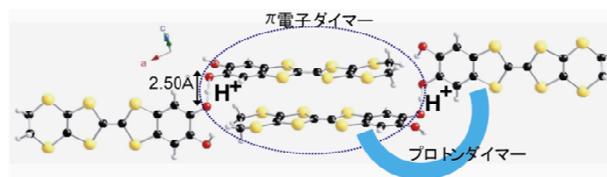
これまで、キンヒドロン錯体において、約 5 GPa の高圧下でプロトンと電子の連動を赤外振動スペクトルで観測したとの報告がある。[1]しかし、有機誘導体においては報告されているものの[2]、伝導体においては無い。

最近我々は、プロトン授受能、電子酸化還元能を有するカテコールが縮環した TTF(テトラチアフルバレン)誘導体を合成し、導電性の単分子種中性ラジカル塩を得た。本講演では、その分子および分子集合体(固体)としてのプロトン-電子相関について報告する。

この研究は、加茂氏、四竈氏、市川氏、磯野博士、高橋准教授(神戸大)、山本薫助教(分子研)との共同研究である。

### <参考文献>

- [1] T. Mitani et al., *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988) 2299.
- [2] H. Suzuki et al., *Chem., Lett.*, **36**, 402 (2007); Ohchi et al., *Physica B*, **405**, S341 (2010).



## 界面電気二重層を利用したエネルギー・情報変換

阿波賀 邦夫 (名古屋大学)

分子性物質や有機物の長を捉えた新しい蓄電機能や光電流変換について研究している。この発表では、ともに固液界面の電気二重層を利用した新しい分子性 2 次電池や光電流変換を紹介する。(1)分子クラスター電池の新しい発展。我々は、正極に金属クラスター錯体を配したリチウム電池を作製し、電子と対イオンの自由なアクセスを確保して高エネルギーかつ高パワー密度の分子性 2 次電池の開拓を目指している[1-3]。基本的には絶縁体であるこのような系を用いると、活物質の酸化還元から期待される値を大きく超える電池容量が得られ、界面電気二重層との複合化によるものであることが分かった。(2)絶縁分極層を利用した新しい光電流変換：絶縁体である有機ラジカル薄膜に光照射したところ、巨大な過渡光電流が現れた[4]。さまざまな解析により、電極界面での電荷分離と薄膜内の分極の相乗効果によって、このような特性が得られるとの解釈を得た。本研究ではこれを発展させ、電荷分離層と絶縁分極層の 2 層膜構造をもつ光電セルを作製し[5]、さまざまな波長に対応できる高効率光電流変換を実現した。

### <参考文献>

- [1] H. Yoshikawa, et al. *Chem. Commun.*, 3169 (2007).
- [2] H. Wang, et al. *Chem. Asian J.*, **6**, 1074 (2011)
- [3] N. Kawasaki, et al. *Angew. Chem Int. Ed.*, **50**, 3471 (2011).
- [4] A. Iwasaki, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 4022 (2009).
- [5] L. Hu, et al. *Appl. Phys. Lett.* **96**, 243303 (2010).

## 白金表面の第一原理シミュレーション

杉野 修 (東京大学物性研究所)

白金表面は様々な触媒作用を示すと同時に興味深い表面科学のテーマとなっている。講演者は共同研究者らと電極触媒反応(水の電気分解)に関する研究を行ってきた[1-3]。実験や他グループの計算との比較を詳細に行うにつれ、計算精度やモデリング法を始めとして残されてきた重要な課題が浮き彫りになってきた。また、本研究で培った計算手法を光触媒機構解明に対しても適用することが新たなターゲットとして浮上してきた。本講演ではこれらの課題について述べ、さらにこれから京コンピュータを始めとする新たな研究環境でどのように計算を展開するかについて述べる。

### <参考文献>

- [1] M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* **73** 115407 (2006).
- [2] O. Sugino, I. Hamada, M. Otani, Y. Okamoto, and T. Ikeshoji, *Surf. Sci.* **601**, 5237 (2007)
- [2] M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Okamoto, and T. Ikeshoji, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 0248021 (2008).

## 人工光合成によるエネルギー変換及び貯蔵

福住 俊一（大阪大学大学院工学研究科生命先端工学専攻）

近年特に深刻化を増す地球環境エネルギー問題を解決するためには、人類が使用するエネルギーは従来の化石燃料に頼るのではなく、自ら生み出した分だけ使用する人工光合成型エネルギー変換システムを構築することが緊急の課題となっている。一方、地球温暖化対策の切り札として、クリーンエネルギーである水素エネルギー社会を目指した研究開発が進んでいる。しかし、水素の貯蔵、放出システムの開発が大きな課題として残されている。本講演では光合成機能を分子レベルで再現する高次に組織化された人工光合成システムによるエネルギー変換について紹介する[1-4]。また、クリーンエネルギーとして期待される水素の貯蔵放出システムについても CO<sub>2</sub> 削減対策にもなる最近の研究成果を紹介する[5]。

### <参考文献>

- [1] Yamada, Y.; Miyahigashi, T.; Kotani, H.; Ohkubo, K.; Fukuzumi, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 16136.
- [2] Fukuzumi, S.; Morimoto, Y.; Kotani, H.; Naumov, P.; Lee, Y.-M.; Nam, W. *Nature Chem.* **2010**, *2*, 756.
- [3] Murakami, M.; Hong, D.; Suenobu, T.; Fukuzumi, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 11605.
- [4] Fukuzumi, S.; Kishi, T.; Kotani, H.; Lee, Y.-M.; Nam, W. *Nature Chem.* **2011**, *3*, 38.
- [5] Fukuzumi, S.; Kobayashi, T.; Suenobu, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 1496, 11866.

## 可視光応答光触媒における電荷、および格子ダイナミクス

松本 吉泰<sup>1</sup>、相賀 則宏<sup>1</sup>、渡邊 一也<sup>1</sup>、工藤 昭彦<sup>2</sup>（京大院理<sup>1</sup>、東京理科大<sup>2</sup>）

本研究は、可視光応答光触媒である BiVO<sub>4</sub> における電荷ダイナミクスと電荷トラップサイトに特有な格子振動の解明を目的として行った。水の光分解などを含む光触媒反応はエネルギー問題の解決に向けた一つの有力な方法である[1]。このためには可視光に反応する高効率の光触媒開発が必要であり、このためには可視光吸収により生ずる電子や正孔のダイナミクス、これらの電荷による光触媒表面での反応機構の解明が重要である。BiVO<sub>4</sub> は電子捕捉剤の存在下で可視光照射により水から酸素を発生し、水素発生型の光触媒と組み合わせることで可視光による水の完全分解が可能な特色ある触媒である。

酸化・還元反応は光触媒表面にトラップされた光誘起電荷によって駆動されるが、このトラップ状態に関する情報はきわめて限られている。本研究では、フェムト秒過渡吸収分光を BiVO<sub>4</sub> に適用したところ、励起光パルス(400nm, 150fs)照射直後の過渡吸収信号に励起光により誘起されたコヒーレントフォノンによる強度変調が重畳することを見いだした。この過渡吸収は電荷トラップ状態が関与する遷移であるため、このコヒーレントフォノンの解析から表面電荷トラップ状態に特有な格子振動、およびそれをもたらす構造に関する情報が得られる可能性がある。

### <参考文献>

- [1] Kudo, A. and Miseki, Y.: *Chem. Soc. Rev.*, 2009, *38*, 253-278.

## 電場誘起による電解液/酸化物界面を用いた新規超伝導体の開発

上野 和紀（東京大学総合文化研究科）

銅酸化物高温超伝導体を始めとする多くの超伝導体は絶縁性の母物質に化学的にキャリアを誘起し、金属状態を作り出す化学ドーピングによって作り出されてきた。しかし、化学ドーピングでは不純物の固溶源という母物質の化学的性質によってキャリア濃度が制限されてしまう。電界効果は絶縁体にキャリアを誘起するもう一つの手法であり、物質の化学的性質によらず外部から印加した電場によるキャリア誘起が可能である。我々は電解液をゲート絶縁層とした「電気二重層トランジスタ」を酸化物半導体  $\text{SrTiO}_3$  と組み合わせることで電解液/酸化物界面に高濃度キャリアを誘起し、化学ドーピングを用いずに絶縁体表面に超伝導を誘起できることを初めて報告した[1]。さらに、電場誘起による新しい超伝導体開発を目的に、従来は超伝導にならないとされてきた  $\text{KTaO}_3$  に研究を展開した。イオン液体を新たに電解液として採用することで化学ドーピングでは到達不可能だった高濃度のキャリアを電場誘起し、 $T_c = 45 \text{ mK}$  の超伝導が実現した[2]。さらに電場によってキャリア濃度に対する超伝導相図を作成、 $T_c$  がベル型のキャリア濃度依存性を示すことを見出した。我々は同様の手法によって強磁性を電場誘起できることをも報告しており[3]、電場誘起による界面への様々な新物性の発現が期待される。

### <参考文献>

- [1] K. Ueno, *et al.*, *Nature Materials* **7**, 855 (2008).
- [2] K. Ueno, *et al.*, *Nature Nanotechnology* **6**, 408 (2011).
- [3] Y. Yamada, K. Ueno, *et al.*, *Science* **332**, 1065 (2011).

## ドーピング光触媒キャリアダイナミクスの分光計測

大西 洋（神戸大学）

光触媒は結晶内部で吸収した光のエネルギーを励起キャリア（電子と正孔）に変えて、表面に存在する反応中心へ伝達し、物質変換（酸化還元反応）に利用する人工的なデバイスである。光触媒の研究開発において現在日本は世界をリードする立場にある。これからも世界をリードし続けるために、新しい光触媒の開発を支える知的基盤を構築する責務が基礎科学研究者に課されている[1]。

本講演では光触媒に添加したドーパントをとりあげる。太陽光による水素燃料生成をめざして光触媒となる無機材料の探索がすすめられ、物質変換効率は 20 年前には考えられなかったほど高い水準に達した[2]。たとえば  $\text{NaTaO}_3$  を適切にドーピングし助触媒を添加すると 50%を超える量子効率で純水を分解し水素と酸素を当量発生する[3]。しかし、依然としてドーパントが電子-正孔再結合反応や励起電子輸送におよぼす役割を演繹的に説明することができず、ゆえにドーパント添加の効果を予見できない。半導体の価電子帯からバンドギャップをまたいで励起された電子は赤外光を吸収してさらに高い励起状態に遷移できる。この吸収を利用して光励起電子と正孔の再結合反応速度を計測し、ドーピングがキャリアダイナミクスにおよぼす効果を検討した結果を述べる。

### <参考文献>

- [1] 大西洋, *Molecular Science* **5** (2011) A0045.
- [2] K. Maeda, K. Domen, *J. Phys. Chem. Lett.* **1** (2010) 2655.
- [3] H. Kato and A. Kudo, *Chem. Phys. Lett.* **331** (2000) 373.

## エネルギー問題の大枠を考える

深井 有（東大生研 中大名誉教授）

わが国のエネルギー自給率は 4%に過ぎないので、エネルギー源を確保することは国の存亡に関わる重大事なのだが、CO<sub>2</sub> 排出削減などに目を奪われて、疎かにされ、議論が歪められてきた嫌いがある。原子力は CO<sub>2</sub> を排出しないクリーンなエネルギー源であるという議論はその一例である。しかし、福島原発の事故は、エネルギー問題を本来あるべき姿で考え直すための契機となった。

そこで、今年の 7 月に、常々考えていたことを一般向けの本にまとめて中公新書として出版した。

「気候変動とエネルギー問題—CO<sub>2</sub> 温暖化論争を超えて」である。本講演では、概ねこの本の主旨にしたがい、わが国の将来のエネルギー問題についての考え方の大枠を述べようとする。

内容は以下のようにまとめられる。

1. 将来のエネルギー源開発は現在のエネルギー需要を充たしながら行わなくてはならない。
2. 集中型のエネルギー供給態勢には限界があるので、分散型を併用しなくてはならない。  
しかし、潜在能力の大きなエネルギー源の開発は必須である。
3. CO<sub>2</sub> 排出削減は温暖化防止のためではなく、炭素資源を保存するためにこそ必要である。
4. エネルギー利用技術においては、CO<sub>2</sub> 排出量ではなく、エネルギー効率を指標とすべきである。
5. 将来にわたって持続可能なエネルギー源、エネルギー・システムはどんなものか。

これらについての具体的な考察にもとづいて、将来に向けての指針を探りたい。

## ISSP ワークショップ

# つくばソフトマター研究会 2011

期間：2011年3月7日～2011年3月8日(2日間)

場所：東京大学物性研究所本館 6F 大講義室

提案者：柴山 充弘、野口 博司、藤井 健太、芝 隼人、瀬戸 秀紀(KEK)

報告：芝 隼人

つくばソフトマター研究会 2011 が平成 23 年 3 月 7-8 日の 2 日間の会期で、物性研究所で開催されました。つくばソフトマター研究会は平成 21 年 2 月に筑波大学にて第 1 回、産業技術総合研究所つくばセンターにおける第 2 回研究会を経て、今回で 3 回目となります。最近、柏キャンパスのみならず、周辺地域でも研究室が少しずつ増えるなどして、ソフトマターの実験、計算、理論をカバーする研究会を開く動きに結びつきました。似た性格の勉強会として、関東ソフトマター研究会という名前の、お茶の水女子大、首都大、東大物理工学専攻などの関係分野の人が集まる研究会も 10 数年前から(資金を持たない手弁当の伝統行事として!)行っていますが、開催趣旨としては似ているところがあります。(錯雑多様ではありつつも)同一の物質群を相交わる視点から対象としている境界分野としての性格が強いからだと思いますが、総じて有志の集まりを大切にしていると思っています。通常の短期研究会の性格とはやや趣が異なるかと思いますが、このような形で開催させていただけたことを感謝しています。

第 3 回目となる本研究会では、「つくば」という枠を超え、つくばエキスプレスをたどって、東大柏キャンパスまでその足場を広げました。ここ 10 年余、東大柏キャンパスとつくば地域の高エネルギー加速器研究機構(及び東海村の日本原子力研究開発機構)には、ゲル、分子複合系をはじめとするソフトマターを対象とし、散乱実験を中心にメソスケールの構造、ダイナミクスを共通する姿勢で研究する実験家の一大クラスターが形成されていました。さらに最近、ソフトマターの計算科学・理論の研究者も産総研、筑波大、物性研、へと新たに参入し、ガラス、生体膜、液晶から高分子系までいたる幅広い範囲をカバーする新しいアクティビティを形成しつつあります。

初日から生憎のみぞれ混じりの寒い日でしたが、予想をやや上回る人数の参加があり、東関東地域にいる関係分野、とりわけ若い方々が多くいらっしやることを改めて認識させられました。講演で印象的だったのは、櫻井先生(千葉大)の電解研磨基板上の螺旋波パターンや、和田先生(京大基研)のバクテリアの自発運動についての講演に代表されるような、ある種、広い自然界のモチーフを取り出してきてその法則の発見、または定量的・物理学的な理解をはかる、という特有のアプローチです。一方で筆者の専門外で理解は浅いのですが、散乱実験などの基盤を置く研究の多くは、あくまで伝統的な手法で新たな物質系を見ていくとどのような世界が開けるのか、という視点からなされているように見えました。当面ソフトマター物理分野では、この 2 軸のアプローチを中心に色々な試みがなされていくような気がしています。

懇親会には、多くの学生の参加もあり、分野や世代を超えた交流が繰り広げられました。太田隆夫京大教授の御挨拶では、つくばソフトマター研究会の歴史や、その前身(?)である関西ソフトマター研究会の歴史などにも言及され、研究会のあり方や若いソフトマター研究者への期待などが述べられました。太田先生をはじめ日本におけるソフトマター・非線形物理(に限らないと思いますが)のアクティビティの形成に重要な貢献をされてきた先生方が、他地域で 1、2 年のうちに一斉に定年の節目を迎えられる時期となっており、今後の分野のあり方について参加スタッフはじめ皆さん、色々考えさせられているかと思っています。

今回の研究会の他の特徴は、これまで以上に化学系、とくに高分子系や合成を軸足にした材料科学者の多数の参加があったことです。また、バイオメカニクスや非線形物理などとの境界領域を研究対象とする興味深い発表もありました。対象材料を振り返れば、ガラス、ゲル、ゴム、コロイド、多糖類、紐状ミセル、ナノファイバー、バクテリア、DNA、イオン液体、液晶など、また、手法としては、中性子散乱、X 線散乱、熱測定、顕微鏡撮像、分子シミュレーション、流動場の理論、摩擦測定、などなど、多岐にわたるものでした。日頃、聞くことのなかった分野の研究発表は刺激的であり、

新たな発見も多かったと思います。物理、化学を軸足としつつも生物学、工学、計算科学とともに交差しつつ発展していく場として、つくばでのソフトマター研究が更なる深化と広がりを見せることを確信しつつ、来年度の研究会(東海地区のどこかで行う予定になっています)での再会を期しております。

最後に特筆すべきこととして、本研究会で話された若手のうちの多くが、つくば地域から巣立たれていっています。全員の行き先を筆者は把握しておりませんが、遠藤先生と山田さん(物性研)は原研、池田さん(筑波大)はガラス物理の盛んなフランス、眞弓さん(東大新領域)も来年からフランス、山口さん(東大物工)は九州大、などと OB/OG が次々と新天地での新たな研究を広げられていきます。彼らの今後のご活躍を心より祈念しつつ、最後に本研究会のプログラムを掲載して本稿を閉じさせていただきたいと思います。

平成 23 年 12 月 26 日

## プログラム

### 3月7日(月)

10:00 - 10:05 Opening remark (柴山 充弘)

10:05 - 10:35 遠藤 仁 (日本原子力研究開発機構)

「中性子スピネコー法を用いた高分子ダイナミクスの研究」

10:35 - 11:05 山室 憲子 (東京電機大学)

「中性子準弾性散乱による多糖類物理ゲルおよび両性イオン水溶液のマイクロダイナミクス」

11:05 - 11:25 鶴沢 英世 (東京大学生産技術研究所)

「コロイド分散系におけるゲル化のメカニズム」

11:25 - 11:45 草野 巧巳 (東京大学物性研究所)

「小角中性子散乱を用いた紐状ミセルのレオロジー挙動の考察」

11:45 - 12:15 佐光 貞樹 (物質・材料研究機構)

「ネットワーク状高分子ナノファイバーの創製と表面機能の探索」

- Lunch -

13:40 - 14:10 和田 浩史 (京都大学基礎物理学研究所)

「細菌の運動と媒質の力学：摩擦、粘弾性、境界条件」

14:10 - 14:40 池田 昌司 (筑波大学)

「重なり合う粒子系のガラス転移」

- Coffee Break -

15:00 - 15:30 上木 岳士 (横浜国立大学)

「イオン液体を一成分とする刺激応答性高分子に関する研究」

15:30 - 15:50 赤木 友紀 (東京大学大学院工学系研究科)

「超均一網目構造を有する Tetra-PEG ゲルの構造と物性」

15:50 - 16:20 藤田 雅弘 (理化学研究所)

「DNA 担持ナノ粒子の非架橋凝集」

- Coffee Break -

16:40 - 17:10 櫻井 建成 (千葉大学)

「電解研磨時において金属ガラス表面上にできるラセン波」

17:10 - 17:40 原 雄介 (産業技術総合研究所)

「新規ゲルアクチュエータの創製とソフトロボットへの応用」

17:40 - 18:00 篠原 佑也 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)

「X 線光子相関分光法によるゴム中のナノ粒子ダイナミクスの観察」

18:00 - 懇親会

3月8日(火)

- 9:30 - 9:50 山村 泰久 (筑波大学) 「エントロピーからながめたりオトロピック液晶における分子ダイナミクス」
- 9:50 - 10:20 青柳 裕子 (産業技術総合研究所) 「一軸伸張下における棒状フィラーを含む弾性複合体の破壊シミュレーション」
- 10:20 - 10:50 山口 哲生 (東京大学大学院工学系研究科) 「高分子ゲルのすべり摩擦におけるスティック-スリップ運動」
- Coffee Break -
- 11:10 - 11:40 米谷 慎 (産業技術総合研究所) 「液晶分子モーターの分子シミュレーション：温度勾配ドライブの検討」
- 11:40 - 12:00 芝 隼人 (東京大学物性研究所) 「メッシュレス膜模型における膜面ゆらぎと膜弾性」
- Lunch -
- 13:30 - 13:50 山田 武 (東京大学物性研究所) 「中性子準弾性散乱による多孔質金属錯体中の水のダイナミクス」
- 13:50 - 14:10 西田 理彦 (東京大学物性研究所) 「マイクロ相分離した高性能ナノコンポジットゲルの微視的構造の研究」
- 14:10 - 14:30 西 健吾 (東京大学大学院工学系研究科) 「Tetra-PEG ゲルのゲル化過程の解析」
- 14:30 - 14:50 眞弓 皓一 (東京大学大学院新領域創成科学研究科) 「ポリロタキサン分子ダイナミクスと環動ゲルの力学物性」
- 14:50 - 15:05 Closing remark (瀬戸 秀紀)

# 物性研究所談話会

標題：A Phenomenological Theory of the Anomalous Pseudogap Phase in Underdoped Cuprates

日時：2011年11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：T. Maurice Rice

所属：ETH Zürich, U. Hong Kong, and Brookhaven National Lab.

要旨：

A consistent theoretical description of the many anomalous properties that characterize the pseudogap phase in the underdoped region of the cuprate phase diagram has proved challenging. The consistent progress in spectroscopic and other experiments suggests a phenomenological approach. An ansatz based on analogies to the transition to Mott localization at weak coupling in lower dimensional systems, has been proposed by Yang, Rice and Zhang\*. This ansatz has had success in describing a wide range of experiments\*\*. The motivation underlying this ansatz is described and some comparisons to experiment are reviewed. Implications for a more microscopic theory are discussed together with the relation to theories that start directly from microscopic strongly coupled Hamiltonians.

\*K.-Y. Yang, T. M. Rice & F. C. Zhang, Phys. Rev. B73,174501 (2006)

\*\* T. M. Rice, K.-Y. Yang & F. C. Zhang, arXiv 1109.0632

# 物性研究所セミナー

標題：理論インフォーマルセミナー：Exact ground states with deconfined gapless excitations for the 3 leg spin-1/2 tube

日時：2011年11月4日(金) 午前11時～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Karlo Penc

所属：Hungarian Academy of Sciences

要旨：

We consider a 3-leg spin-1/2 ladder with periodic boundary conditions (a spin tube) with a Hamiltonian given by two projection operators, one on the triangles, and the other on the square plaquettes on the side of the tube, that can be written in terms of Heisenberg and four spin ring exchange interactions. Depending on the relative strength of these two operators, we identify 3 phases: (i) for strongly antiferromagnetic exchange on the triangles, an exact dimerized ground state wave function with a gapped spectrum can be given as an alternation of spin and chirality valence bonds between nearest triangles; (ii) for ferromagnetic exchanges on the triangle we recover the phase of the spin-3/2 Heisenberg chain; (iii) between these two phases a gapless incommensurate phase exists. Furthermore, we explicitly construct an exact ground state wave function with two deconfined domain walls and gapless excitation spectrum at the quantum phase transition point between the incommensurate and dimerized phase.

Based on the following manuscript: <http://arxiv.org/abs/1107.5501>

標題：Dynamics of topological defects in magnets

日時：2011年11月4日(金) 午後4時～午後6時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Oleg Tchernyshyov

所属：Dept. of Physics and Astronomy, Johns Hopkins Univ.

要旨：

Topological defects play a major role in magnetic phase transitions (e.g. domain walls in the Ising model and vortices in the XY model). They also strongly influence the dynamics of magnetization away from equilibrium. The classic examples are Walker's problem of the Bloch domain wall in one dimension and the problem of a vortex confined to a disk. After a brief overview of these cases, I will describe some of the modern problems such as the dynamics of an array of defects (a skyrmion crystal) and that of a line defect (a Bloch domain wall in a thin film). In all of these examples, the dynamics of magnetization is dominated by the effects of the Berry phase associated with non-coplanar trajectories of spins.

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：9回目「強相関係における非平衡物理」

日時：2011年11月7日(月) 前10時30分～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：岡 隆史

所属：東大物理

要旨：

関連電子系はモット転移、超伝導、磁性など多彩な相転移現象が発現し多くの研究者を魅了してきた。中でも、近年はその非平衡現象に対する関心が高まっている。本講演ではイントロに続き以下の話題について解説する。

1. モット絶縁体における非線形ダブロン生成[1]：サブギャップレーザーをモット絶縁体に照射した場合、低温では多光子吸収と量子トンネル効果によってダブロンが生成される。厳密解を用いてこの現象を解析した結果、二つの機構の間のクロスオーバーがあること (Keldysh 理論)、そして、生成されるダブロン分布関数が大きく変化することが分かった。
2. 相関係における反転分布と斥力・引力転換[2]：強力なレーザー光を照射することで反転分布を実現する可能性について議論する。もしも反転分布が実現すれば、電子間斥力を引力に転換することができる。

[1] T. Oka arXiv:1105.3145 (unpublished).

[2] N. Tsuji, T. Oka, P. Werner, H. Aoki, Phys. Rev. Lett. 106, 236401 (2011).

標題：理論インフォーマルセミナー：疎水性床上的 predrying 転移とそのダイナミクス

日時：2011年11月10日(木) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：勅使河原 良平

所属：京都大学大学院理学研究科

要旨：

我々は、一成分 van der Waals 流体における predrying 転移について、その静的な性質とダイナミクスを調べた[1]。まず、predrying 転移について説明する。液体中に疎水性の床が置かれている系を考える。この床付近では、流体は床によって撥ね付けられ、バルク(床から遠く離れた位置)での液体の密度よりも小さい密度をとる。流体が撥ね付けられる度合いは、バルクの状態(密度・温度・圧力)や床の疎水性の強さによって決まる。このとき、バルクの状態を変化させていくと、平衡状態での密度プロファイルがジャンプする場合があります、これを predrying 転移と呼ぶ。この一次相転移は、次の二つの密度プロファイル間でのジャンプである。

- (1) 床付近で比較的高い密度(バルクの液体の密度よりは低い)をとるプロファイル(バルク密度に至るまでの距離が短い。つまり、薄い層を形成。)
- (2) 床付近で比較的低い密度をとるプロファイル(厚い層を形成。)

この(1)と(2)の状態間での変化は、経路に応じて、ある点でプロファイルがジャンプする場合(predrying 転移)と終始連続的にプロファイルが変化する場合とがある。この predrying 転移は、 $T$ - $n$ (もしくは  $T$ - $p$ )相図上に描かれる線分、predrying 線を横切ると起きる。我々は、van der Waals モデルを用いて predrying 転移について数値的に調べた。また、我々は predrying 転移が起こる際のダイナミクスについても数値計算を用いて調べた。predrying 転移では床付近で蒸発と液化が起こるが、動的 van der Waals モデル[2]を用いることによって、predrying 転移の際にどの様に蒸発や液化が起きているかについて、また潜熱の影響について明らかにした。

[1] R. Teshigawara and A. Onuki, Phys. Rev. E 84, 041602 (2011).

[2] A. Onuki, Phys. Rev. E 75, 036304 (2007).

標題：Time-of-flight Neutron Scattering and the Quantum Spin Ice Ground State of  $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

日時：2011年11月25日(金) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Bruce D. Gaulin

所属：McMaster University

要旨：

New time-of-flight neutron scattering instrumentation is opening up opportunities for exciting new science, especially in the study of exotic magnetic ground states in materials. These low temperature states can arise as a consequence of geometrical frustration, low dimensional structures, and quantum fluctuations, all of which discourage order and allow the possibility for novel states of matter to appear. I will discuss some of our recent work on the frustrated pyrochlore magnet  $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ . As I'll describe, this material can be thought of in terms of quantum  $s=1/2$  spins with XY anisotropy decorating a network of corner-sharing tetrahedra. At moderate temperatures, our results show unexpected two dimensional magnetism arising within a three dimensional crystal structure. At lower temperatures, a disordered ground state, and a magnetic field-induced quantum critical point is observed. Inelastic spin wave scattering within the polarized state at high fields allows a determination of much of the microscopic spin Hamiltonian for the system, and the zero-field ground state is argued to possess many similarities to that which ice (the kind you skate on!) displays - albeit a magnetic, quantum version known as quantum spin ice.

標題：新規  $245\text{FeSe}$  超伝導体の中性子散乱研究

日時：2011年11月25日(金) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：Prof. Wei Bao

所属：Department of Physics, Renmin University of China

要旨：

We determine using neutron and x-ray diffraction method the sample composition, crystalline structure and magnetic order of the recently discovered  $\text{A}_2\text{Fe}_4\text{Se}_5$  superconductors ( $\text{A}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{Tl/K}$  or  $\text{Tl/Rb}$ )[1-3]. Contrary to initial belief that these materials are heavily electron-doped variety of the 122 family of Fe-based superconductors, they are almost charge balanced with the Fe valence close to  $2+$ , as in the 11 iron selenide superconductors [4]. Different from previous families of Fe-based superconductors [4-6], the structural and antiferromagnetic transitions in the 245 materials do not break the tetragonal crystalline symmetry. It is remarkable that the strong antiferromagnetic order of very large ordered magnetic moment  $3.3\mu\text{B}$  per Fe and a very high Neel temperature coexists with the superconductivity below  $T_c\sim 30\text{K}$  [1,3,7]. With Fe vacancy number departs from what the chemical formulas  $\text{A}_2\text{Fe}_4\text{Se}_5$  and associated ideal vacancy order would allow, a disordered version of the Fe vacancy order results at base temperature while phase separation into two vacancy-ordered phases exists at the intermediate temperature range [7]. The site disorder renders the materials insulating and destroys the superconductivity, similar to the situation in the 11 materials where a spin glass order weakly localizes the Fermi liquid [8].

[1] W. Bao et al., Chin. Phys. Lett. 28, 086104 (2011).

[2] P. Zavalij et al., Phys. Rev. B 83, 132509 (2011).

[3] F. Ye et al., Phys. Rev. Lett. 107, 137003 (2011).

[4] W. Bao et al., Phys. Rev. Lett. 102, 247001 (2009).

[5] Y. Qiu et al., Phys. Rev. Lett. 101, 257002 (2008).

[6] Q. Huang et al., Phys. Rev. Lett. 101, 257003 (2008).

[7] W. Bao et al., arXiv: 1102.3674 (2011).

[8] T.J. Liu et al. Nature Materials 9, 716 (2010).

標題：理論セミナー：Boundary bound states in spin-1/2 antiferromagnetic chains

日時：2011年11月25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：古谷 峻介

所属：物性研究所

要旨：

Several gapped one-dimensional quantum antiferromagnets can be described by integrable field theories. Elementary excitations in these systems are well understood despite their strongly correlated nature, and this has been verified in numerous experiments. Impurity problems are another fascinating issue in quantum many-body systems. In gapless one-dimensional systems with impurities, boundary conformal field theory leads to interesting consequences such as edge anomalies of the magnetic susceptibility and the NMR relaxation rate. In gapped spin chains, on the other hand, the elementary excitations can form bound states localized at the boundary.

We point out that a spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg chain with a staggered magnetic field can be described by an integrable field theory even in the presence of the boundary, and its exact solution contains the “boundary bound states”. We identify the previously unaccounted resonances observed in ESR spectra of  $\text{KCuGaF}_6$  and  $\text{Cu-PM}$ , with the boundary bound states. This might be the first experimental observation of the boundary bound states.

標題：理論セミナー：第一原理からのモデル原子間ポテンシャル生成手法“熱力学的ダウンフォールディング法”の最近の応用

日時：2011年12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：吉本 芳英

所属：鳥取大学工学部応用数理工学科

要旨：

分子動力学計算を高精度に行うためには高精度な力場が必要である。そのような力場は第一原理電子状態計算で手に入れることができるが、大変計算規模が大きいために、分子動力学で追跡可能な物理時間は10ps程度に制限されている。これを超えて長時間のシミュレーションを行いたい場合に可能な方法の一つは、第一原理計算からより計算負荷の小さいモデル原子間ポテンシャルを定めることである。

この種の方法の一つとして吉本は「熱力学的ダウンフォールディング法」を提案している。この手法では、マルチカノニカル法が与える統計集団に対象系の熱力学全体を代表する性質があることを活用して、最大限熱力学を保持するようにモデルを自己無撞着に定める。[1, 2]

この講演では最近の応用例である  $\text{Cu-Zr}$  バルク金属ガラス系への応用について報告をする。この系の融解の性質は純粹に熱力学的であるが、ガラス化は非平衡の性質であり、これがこの手法でどの程度再現可能かを報告する。

また時間が許せば他に氷-水系への応用についても報告を行う。

[1] Y. Yoshimoto, J. Chem. Phys., 125, 184103 (2006),

[2] Y. Yoshimoto, J. Phys. Soc. Jpn., 79, 034602 (2010).

**標題：理論セミナー：フラストレート伝導系に現れる非自明な秩序 –カイラリティ、部分無秩序、スピンアイス–**

**日時：2011年12月7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：求 幸年**

**所属：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻**

**要旨：**

正三角形を基本とする格子構造を有する系では、相互作用の競合（フラストレーション）によって長距離秩序が抑制され、巨視的な数のエネルギー的に縮退した状態が現れうる。この巨視的な縮退は、複雑な秩序形成や液体的な振舞い、外場に対する巨大な応答といった様々な興味深い現象の源泉となっている。こうしたフラストレーションの効果は、主に局在スピン系において長い間研究が行われているが、近年になって、相関の強い遍歴電子系においても大きな注目を集めている。そこでは、強いフラストレーションにさらされた磁性と電荷の自由度との結合により、新しい秩序形成や金属絶縁体転移、磁気伝導現象などが期待される。

本講演では、局在スピンと遍歴電子が相互作用する系、いわゆる近藤格子系において、フラストレーションがもたらす興味深い現象に関する我々の最近の研究成果を報告する。具体的には以下に挙げるトピックを議論する予定である。

(1) スピンスカラーカイラル秩序の形成と高次のコーン効果による正の有効双二次相互作用、(2) 反強磁性秩序と近藤スピナー重項が共存した部分無秩序状態の形成、(3) 金属スピンアイス液体状態の発現と非近藤抵抗極小現象。

**標題：新物質セミナー：NMR/NQR による Pu 化合物の磁性と超伝導**

**日時：2011年12月12日(月) 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：安岡 弘志**

**所属：日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター**

**要旨：**

今年の9月末までロスアラモス国立研究所で行ってきた NQR と NMR 法を用いた Pu 化合物の磁性と超伝導の研究について紹介する。

1) PuCoIn<sub>5</sub> の超伝導

最近、ロスアラモス国立研究所で発見された超伝導体 PuCoIn<sub>5</sub> (TC=2.2K) における In 核の、主として、NQR による研究を紹介する。Pu 化合物の超伝導は数年前に発見された同じ構造を持つ PuCoGa<sub>5</sub> (TC=18K) が有名であるが、これとの比較から超伝導発現機構として量子臨界点近傍での価数（電荷）揺動の重要性について議論する。

2) <sup>239</sup>Pu NMR の観測

従来、Pu 化合物の NMR や NQR による研究はリガンドサイトの原子核を用いて間接的に行われてきたが、今回 PuO<sub>2</sub> において <sup>239</sup>Pu の NMR 観測に初めて成功した。<sup>239</sup>Pu の NMR 信号の探索は世界中で多くの物理や化学の研究者によって試みられてきたが未だに達成されていなかった。今回の成功は固体物理の分野のみならずアクチノイド核化学、核燃料の分野でも注目され新しい“Pu-Science”の世界が開けるものと期待されている。

標題：理論セミナー：パイロクロア酸化物  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  におけるノンコリニア磁性とスピン軌道相互作用の効果

日時：2011年12月16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：産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

要旨：

近年、典型的な幾何学的フラストレーション系として、パイロクロア酸化物の低温物性が盛んに研究されている。 $5d$ パイロクロア酸化物  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  は、反強磁性秩序化を伴う電子的な金属絶縁体転移を  $225\text{ K}$  付近で示すことが実験から知られている[1,2]。しかし、30年以上にわたる研究にもかかわらず、未だ低温相の性質は良く理解されていない。また、いくつか奇妙な低温物性が指摘されている。(1) 高い金属絶縁体転移温度や明瞭な光学ギャップの発達に関わらず、電気抵抗の温度依存性からは明瞭な電荷ギャップが観測されない。(2) 一般的にフラストレーションは磁気転移を抑制するが、この物質の転移温度はパイロクロア酸化物の中でも際だって高い。

今回の発表では、相対論的第一原理計算コード QMAS [3]を用いて、この物質の電子状態を理論的に調べた結果を紹介する[4]。電子構造計算には、LSDA+ $U$ 法を用いた(LSDAは local spin density approximation,  $U$ は on-site repulsionを表す)。我々は、all-in/all-out型と呼ばれるノンコリニア・スピン配置が、広くかつ適当な大きさの  $U$  の範囲で安定に存在することを見いだした。これは、近年の実験[5,6]で指摘されている磁気構造と一致する。この物質では、数百 K 程度の容易軸磁気異方性が幾何学的フラストレーションを解消することで、磁気構造が安定化されている。また、反強磁性金属・絶縁相間の転移は連続であり、その近傍で、バンド構造がセミメタル的かつ状態密度が高エネルギー(約  $0.2\text{ eV}$ )まで抑制されることを見いだした。現実の物質が相境界近傍に位置していると仮定すれば、これらの結果は本物質の低温物性を自然に説明することが可能である。

[1] A. W. Sleight *et al.*, Solid State Comm. **14** (1974) 357.

[2] D. Mandrus *et al.*, Phys. Rev. B **63** (2001) 195104.

[3] <http://qmas.jp/>

[4] H. Shinaoka, T. Miyake, and S. Ishibashi, arXiv:1111.6347v1.

[5] J. Yamaura, K. Ohgushi, H. Ohsumi, T. Hasegawa, K. Sugimoto, S. Takeshita, A. Tokuda, M. Takata, I. Yamauchi, M. Udagawa, M. Takigawa, H. Harima, T. Arima, and Z. Hiroi (unpublished).

[6] I. Yamauchi, M. Takigawa, J. Yamaura, Z. Hiroi (unpublished).

標題：シリーズセミナー：極限コヒーレント光科学 10回目「フェムト秒時間分解電子回折法による超高速固体構造力学」

日時：2011年12月19日(月) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：谷村 克己

所属：大阪大学産業科学研究所

要旨：

固体における種々の超高速構造力学を直接的な知見に基づいて研究するため、 $100\text{ fs}$  の時間分解能を有する透過型電子回折装置を開発した。この装置は、① $100\text{ fs}$  の時間分解能、②シングルショット回折イメージ測定、③ $10^{-3}$  以下のエネルギー分散、④ $1.6\text{ \AA}^{-1}$  におよぶ広い運動量空間情報の直接検出、等、多くの特徴を有する。この装置とフェムト秒レーザーを励起源として組み合わせた時間分解電子回折測定系を構築し、レーザー光励起後の結晶構造変化の直接的時間分解追跡を展開している。本講演では、①強励起された金単結晶の warm dense matter としての超高速構造変化、②レーザー励起された Si 単結晶の超高速構造応答、等を中心に、得られている結果を紹介すると共に、今後の展望を議論する。

標題：ナノサイエンスセミナー：Beyond Graphene - Synthesis of Epitaxial Silicene Sheets

日時：2011年12月22日(木) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Guy Le Lay

所属：Aix-Marseille University, CNRS-CINaM, Marseille-Luminy, France

要旨：

We have just synthesized in Marseille silicene sheets, i.e., the silicon equivalent of graphene upon in-situ epitaxial growth on silver (111) surfaces. The honeycomb atomic structure with a lattice parameter of 0.39 nm is revealed in Scanning Tunneling Microscopy, while the long-range epitaxial order is confirmed by sharp Low Energy Electron Diffraction patterns. Conical band dispersions at the corners of the silicene Brillouin zone (K and K' points) evidenced in High-Resolution Synchrotron Radiation Angle-Resolved PhotoElectron Spectroscopy measurements, point to Dirac fermions, i.e., massless relativistic carriers, with quite the same Fermi velocity as graphene, and four times higher than previously obtained on a one-dimensional grating of silicene nano-ribbons. Density Functional Theory calculations in the General Gradient Approximation -including the Ag(111) substrate- confirm the stability of the epitaxial arrangement. The demonstration that silicon can form sheets of silicene, a two dimensional honeycomb low buckled structure, which does not exist in Nature, is tantalizing for new Physics. Silicon being the workhorse of electronics industry, this synthesis could have a major impact for novel devices because of the compatibility with existing Si technologies.

標題：放射光セミナー：銅酸化物と鉄ニクタイトのL端共鳴非弾性X線散乱

日時：2011年12月26日(月) 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：遠山 貴己

所属：京都大学基礎物理学研究所

要旨：

3d 遷移金属酸化物の遷移金属 L 吸収端での共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) では、内核 2p 電子の 3d 軌道への励起を経て、3d 軌道間の電荷励起 (d-d 励起) が観測される。また、2 マグノン励起を伴った同一 3d 軌道内励起が低エネルギー領域に現れる。最近、これらの励起に加えて、スピン反転励起 (マグノン励起、パラマグノン励起) が観測され始めた。この励起はコア・ホールのスピン・軌道相互作用に起因することが知られている。銅酸化物高温超伝導体の母物質では、非弾性中性子散乱と一致する単一マグノン励起が明瞭に観測されている。ホールドープされた LSCO 系では、不均一性に起因した複数のマグノン励起が、また、YBCO 系ではドーピング依存性の小さな高エネルギー・パラマグノン励起が報告されている。

本セミナーでは、まず、最近の銅酸化物に対する銅 L 吸収端 RIXS に関するレビューを行う。そのうち、中間状態の微細構造を無視する高速衝突近似のもとで、 $t$ - $t'$ - $J$  模型に対して計算された RIXS スペクトルを示し、YBCO 系の実験結果との比較を行う。さらに、遷移金属化合物の金属状態の RIXS の特徴を明らかにするため、鉄系ニクタイト系超伝導体の反強磁性金属状態に注目する。我々は、5 バンド・ハバード模型の乱雑位相近似に基づいて、鉄 3d 軌道の動的スピン・電荷感受率を計算し、高速衝突近似のもとで、鉄 L 吸収端 RIXS スペクトルを求めた[1]。この結果に基づいて、反強磁性金属状態において、マグノン励起と電荷励起がどのように RIXS スペクトルに現れるか議論し、L 吸収端 RIXS の今後の発展方向について述べる。

[1] E. Kaneshita, K. Tsutsui, and T. Tohyama, Phys. Rev. B 84, 020511(R) (2011).

# 人 事 異 動

## 【研究部門等】

○ 平成 23 年 12 月 1 日付け

(採 用)

氏 名	所 属	職 名	備 考
原 田 慈 久	附属軌道放射物性研究施設	准 教 授	東京大学大学院工学系研究科特任准教授より

○ 平成 24 年 1 月 1 日付け

(採 用)

氏 名	所 属	職 名	備 考
上 田 顕	新物質科学研究部門	助 教	大阪大学大学院理学研究科特任研究員より
小 濱 芳 充	附属国際超強磁場科学研究施設	特任助教	米国ロスアラモス国立研究所 PD 研究員より

## 物性研だより第 51 巻目録 (第 1 号～第 4 号)

### 第 51 巻第 1 号 2010 年 4 月

所長再任にあたって	家 泰弘	1
物性研に着任して	左右田 稔	2
	石井 順久	3
外国人客員所員を経験して	VEKHTER, Ilya	4
物性研究所談話会		6
物性研究所セミナー		7
物性研ニュース		
○人事異動		13
○東京大学物性研究所教員公募について		16
○平成 23 年度前期外来研究員一覧		19
○平成 23 年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧		33
○平成 23 年度中性子回折装置共同利用採択課題一覧		38
○平成 23 年度後期共同利用の公募について		50
○平成 22 年度外部資金の受入について		51
その他		
○第 56 回物性若手夏の学校		52
編集後記		
物性研だよりの購読継続について		

### 第 51 巻第 2 号 2011 年 7 月

物性研に着任して	多田 靖啓	1
	中村 大輔	2
	吉田 靖雄	3
	藤井 健太	5
物性研を離れて	根岸 正己	6
客員所員を経験して	小野田繁樹	8
研究室だより		
○大谷研究室	大谷研究室	10
ISSP 学術奨励賞受賞後所感	山内 徹	16
第 8 回物性研究所所長賞学術奨励賞所感	佐藤 昌利	19
物性研究所短期研究会		
○ガラス物理の諸問題 —実験と理論の接点—		22
物性研究所談話会		53
物性研究所セミナー		55
物性研ニュース		
○人事異動		66
編集後記		

## 第 51 卷第 3 号 2011 年 10 月

### 物性研究所短期研究会

○小角・反射率・高分解能装置研究会	1
物性研究所談話会	3
物性研究所セミナー	5
物性研ニュース	
○人事異動	12
○東京大学物性研究所教員公募について	13
○平成 23 年度後期短期研究会一覧	14
○平成 23 年度後期外来研究員一覧	15
○平成 23 年度後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧	27
○平成 24 年度前期共同利用の公募について	30

### 編集後記

## 第 51 卷第 4 号 2012 年 1 月

計算物質科学研究センターの設立について	川島 直輝	1
物性研に着任して	藤堂 眞治	5
客員所員を経験して	小嗣 真人	7
超流動 $^3\text{He}$ の Surface Andreev bound state と Majorana fermion	奥田 雄一	10
外国人客員所員を経験して	R. Torsten Clay	13
研究室だより		
○嶽山研究室		15
○上床研究室		24
物性研究所短期研究会		
○エネルギー変換の物性科学		34
ISSP ワークショップ		
○つくばソフトマター研究会 2011		56
物性研究所談話会		59
物性研究所セミナー		60
物性研ニュース		
○人事異動		67
物性研だより第 51 巻目録 (第 1 号～第 4 号)		68

### 編集後記

## 編集後記

今年はキャンパス内にサッカー広場が出来るかも知れません。私のようなアウェー嫌いにはキャンパス内でサッカーが出来るのが何よりです。今か今かと心待ちにしている今日この頃です。私がなぜアウェー嫌いなのかは分かりませんが、端的に言って人間が小さいからでしょうか。器が小さい、肝っ玉が小さい、背が小さいと「小さい」だらけの私は、アウェーでは萎縮してもっと小さくなります。そのくせホームでは大きい顔をしているらしいので、やはり人間が小さい。こんな小さい私は、サイエンスもスモール LOVE です。私だけで無く、物性研究自体が基本スモールサイエンスなので、これは当然かも知れません。それでも最近はビッグサイエンスの影響がどんどん強まっており、ビッグの中でスモールをやらせてもらう感じの研究が増えています。「計算物質科学研究センター」もビッグなプロジェクトの一端を物性研が担うお話のようです。物性研にはすでにビッグサイエンスと関わりの深い「中性子」と「放射光」の各施設があります。いずれもユーザーが多く、重要な物性研究の手法であるからこそ物性研が任されているわけですが、スモールな物性研がビッグな研究機関とどの様に関わっていくのか？という問題は簡単ではありません。極端なことを言うと物性研が空洞化する可能性だってあるわけで、物性研がやることとやらないことの見極めが重要になって来るでしょう。私のイメージでは、物性研はマシンタイムをあげる側であって、もらう側ではない気がします。空洞化を防ぐためにも、ここ柏キャンパスでの研究を充実させてマシンタイムをあげる側であり続けたいと思います。ちなみに「強磁場」は設備が大きいためビッグと思われがちですが、間違いなくスモールです。あえて言うなら最大規模のスモールサイエンスでしょうか。柏キャンパスというホームで「サッカー」と「強磁場」の日々、研究者冥利に尽きます。

金道浩一