

物性研だより

第52巻
第4号

2013年1月

目次

- 1 国際超強磁場科学研究施設 — 過去、現在、そして近未来 嶽山 正二郎、金道 浩一
- 8 物性研に着任して 宮脇 淳
- 9 渡邊 浩
- 10 笠松 秀輔
- 11 物性研を離れるにあたって 佐藤 卓
- 13 客員での研究の紹介 高橋 一志
- 15 平成24年度客員所員を経験して 山口 明
- 17 一客員所員の夢 小林 達生
- 研究室だより
- 18 ○ 川島研究室 川島 直輝
- ISSP国際ワークショップ
- 24 ○ ナノスケール活性領域の3D原子イメージング
- ISSPワークショップ
- 33 ○ 強相関物質開発の最前線
- 40 第57回物性若手夏の学校開催報告 河底 秀幸
- 45 物性研究所談話会
- 46 物性研究所セミナー
- 物性研ニュース
- 56 ○ 受賞
- 57 ○ 東京大学物性研究所一般講演会
- 58 ○ 人事異動
- 59 ○ 東京大学物性研究所教員公募について
- 61 物性研だより第52巻目録 (第1号～第4号)
- 編集後記



東京大学物性研究所

Copyright ©2013 Institute for Solid State Physics,
The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

国際超強磁場科学研究施設 – 過去、現在、そして近未来

附属国際超強磁場科学研究施設 嶽山 正二郎、金道 浩一

これまで

本施設は、極限環境物性研究部門所属のうち強磁場の3研究室から発足した。長田研究室及び平成15年に三浦研の後を引き継いだ嶽山研究室、平成16年から後藤研の後を引き継いだ金道研究室である。平成16年から準備を進めていた「強磁場発生用直流電源フライホイール」導入のための概算要求が認可された平成18年と同時発足である。文部科学省特別研究経費による概算要求事項「国際物性研究拠点：強磁場コラボラトリーの形成」は平成18年から平成21年までの4年間の計画で走るようになった。そして組織として、長田研は極限環境物性研究部門に所属し、本施設は兼任の形をとった。施設名の冒頭の「国際」は、柏キャンパスが東大3極の位置づけで「国際キャンパス」であることから、当時の小宮山総長からの直令による。

このとき策定した組織構想を図1に示す。電磁濃縮法を始めとする100テスラ以上の超強磁場を用いた物性研究を進める破壊型超強磁場グループ(嶽山研)に並び、世界最大の直流電源フライホイールを用いた100テスラ計画を推進し、これを広く国内外のユーザーに提供し強磁場科学を展開する非破壊超強磁場グループ(金道研)を配置したものである。平成19年に金道研を補う研究室として徳永所員が、続いて平成20年には嶽山研に対して松田所員が加わった。

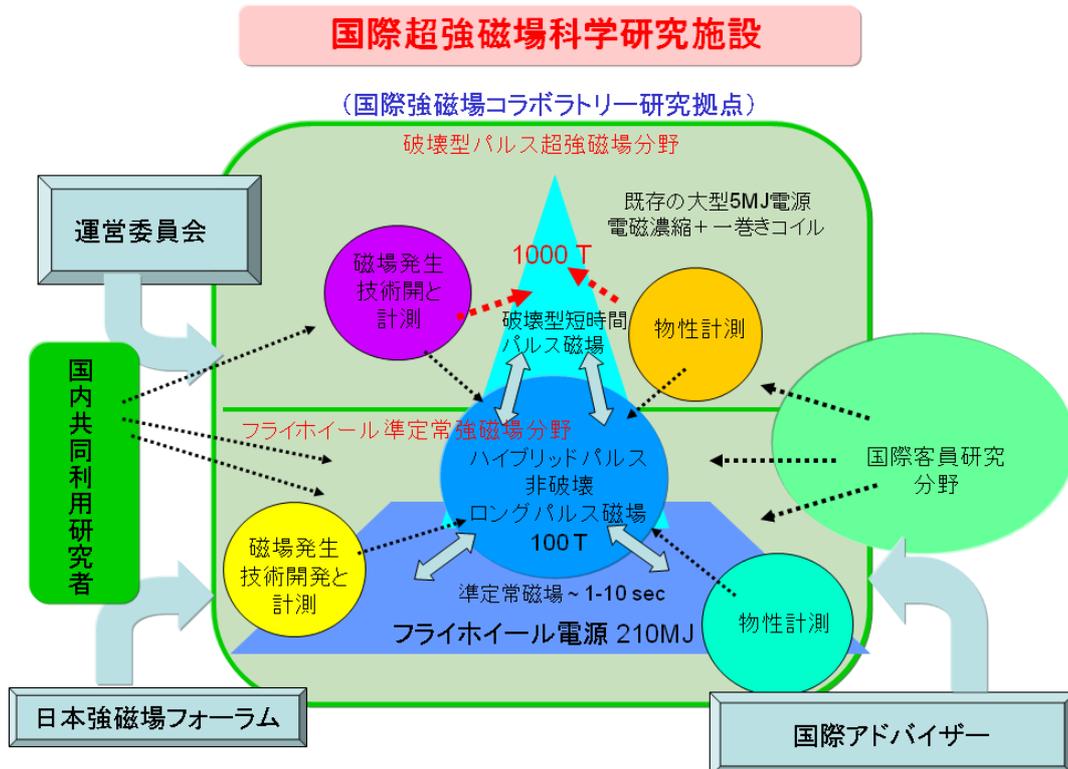


図1. 国際超強磁場科学研究施設設立組織構想図。

嶽山研のミッションは 1000 テスラの超強磁場発生方法の開拓、松田研は 100 テスラ以上の極限超強磁場領域での信頼性の高い物性計測の開拓を行うことにより新しい物性分野を切り開くこととした。金道研はフライホイールを用いた 100 テスラ非破壊パルス強磁場マグネットの開発(図 2)と共同利用の促進、徳永研は非破壊パルス強磁場を用いた高度な物性計測技術の構築により国内外の共同研究を通してインハウス研究を推進することである。

このような体制のもとに、東大物性研、東北大金研、阪大、物材機構の強磁場主要施設を核としたオールジャパンの「強磁場コラボラトリー」プランの一翼を担い、世界トップレベルのパルス強磁場科学研究拠点形成の口火を切った(図 3)。平成 19 年にはフライホイール棟が完成、平成 20 年には 210 MJ という世界最大のフライホイール直流電源も設置完了、5 月には運転開始式を行った。柏キャンパス内での施設の場所と主立った強磁場発生設備を図 4 と図 5 に示した。

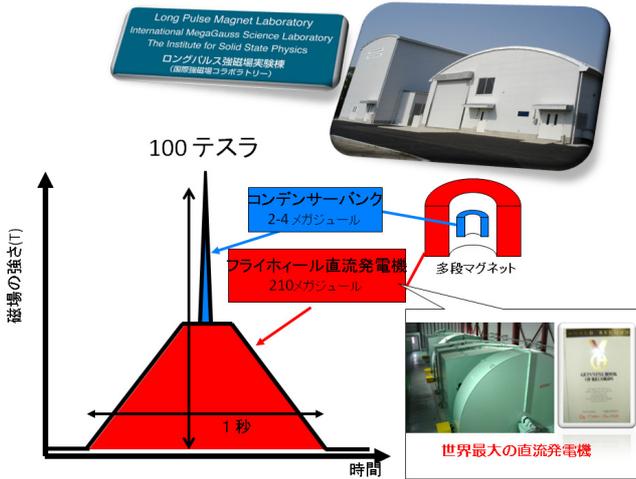


図 2. 平成 20 年に完成したフライホイール実験棟(ロングパルス強磁場実験棟)とフライホイール直流電源とこれを用いた 100 テスラ計画の模式図。マグネットは多段で、中コイルはコンデンサ電源から電流が供給される。

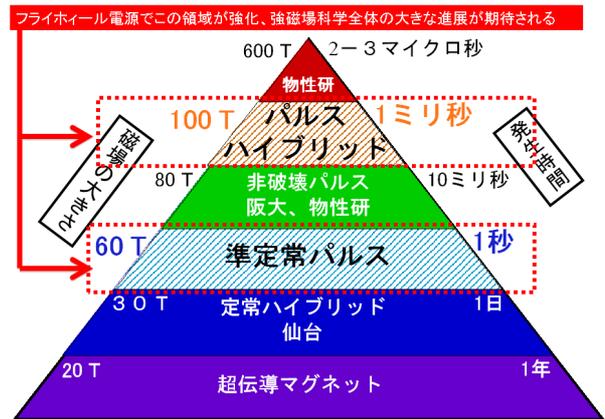


図 3. 強磁場コラボラトリー計画の中での「強磁場ピラミッド」。横方向が磁場発生時間、縦方向が磁場発生の最高値を示す概念図。施設設立にあたり「フライホイール計画」では、図の赤い点線の枠の領域を充足し、強磁場科学全体の進展に寄与させることを挙げた。このとき、破壊型超強磁場はまだ当時の 600 テスラのままになっている。

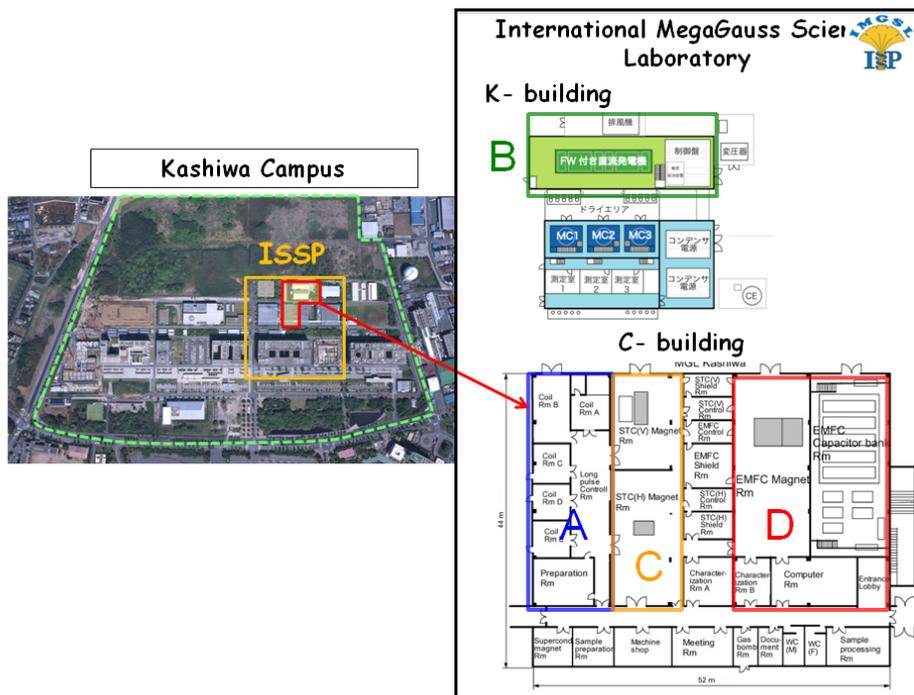
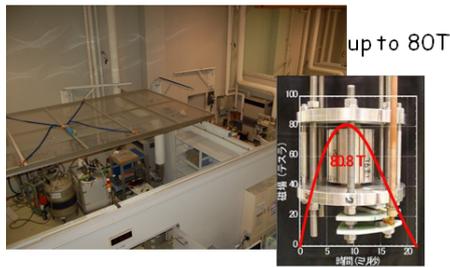
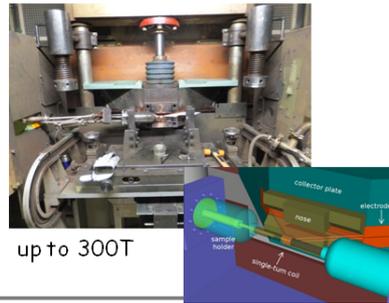


図 4. 柏キャンパスの中での物性研究所及び国際超強磁場科学研究施設。A, B, C, D は夫々図 5 の設備を擁する。

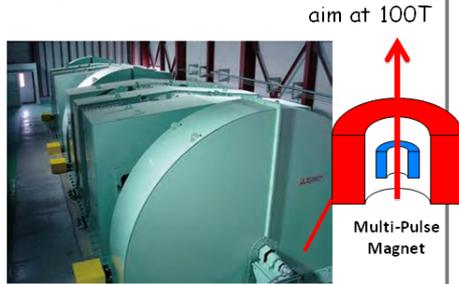
A : Pulse magnet (non-destructive)



C : Single-turn coil



B : Flywheel DC generator



D : Flux compression

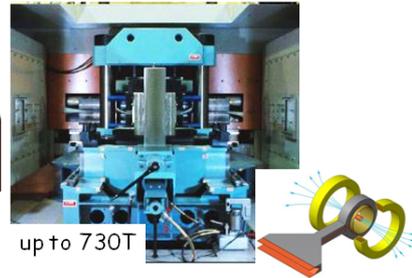


図 5. 国際超強磁場科学研究施設内の主立った設備。A・・・D は、夫々図 4 の右図の記号の位置に配置されている。

破壊型超強磁場の現状

横型一巻きコイル法による超強磁場発生は、平成 11 年の柏移転の折り、六本木時代の 40 kV, 100 kJ コンデンサバンクから 50 kV, 200 kJ に更新された。設置後の様々な不具合の調整はほぼ完了し、物性測定は極低温でも 200 テスラ程度の磁場発生が可能となっており、ファラデー回転によるフラストレート磁性体や直交ダイマー系など量子スピン磁性体の磁気測定、低温酸素や磁性体、カーボンナノチューブなど可視領域でのストリーク分光法を用いた磁気光学測定、炭酸ガスレーザー等を用いた化合物半導体、グラフェンなどの超強磁場サイクロトン共鳴実験などで研究成果が得られつつある。

柏移転で縦型一巻きコイルが新規導入された。100 kJ x 2, 40 kV である。200 kJ で使用することも、また、100 kJ でも単独に使用できるようになっている。縦一巻きコイル専用の液体ヘリウム低温容器の開発に成功し、ピックアップコイル法による磁化測定も高い精度で測定できるようになった。従来微分磁化による磁化の轉移のみが定量評価の対象であったが、ここにきて、磁化の絶対値が高い精度で議論できるデータを得るまでになった。この装置は、フラストレート磁性体、量子スピン系など様々な磁性物質の超強磁場磁化過程の研究に活躍している。2 K という極低温で 100 テスラ超まで安定して物性測定できるようになったことが大きな成果として挙げられる。

電磁濃縮超強磁場発生装置は、平成 11 年の柏移転時に主電源と磁場発生装置が更新された。このとき、電源の内部インピーダンスを下げる改良がなされ、六本木時代より磁場発生効率が上がった。また、主コイルに工夫を入れることにより発生磁場最高値がそれまでの 550 テスラから 600 テスラに引き上げられた。更に、平成 16 年から電源、磁場発生装置、コイルなど精力的に抜本的改良をおこない、磁場発生値は更に 700 テスラを達成し、室内磁場発生世界最高記録が更新された。その磁場発生の再現性においても格段の進歩をみた。物性計測の開発にも力が注がれた。フラストレート反強磁性体 $ZnCr_2O_4$ において 4.5 K という極低温での 600 テスラまで飽和磁化過程の観測に成功した。そこで、飽和直前の超強磁場領域に新しい磁気相が発見され、国内外の高い評価を得るに至った。極低温でのこのような超強磁場での物性測定は世界でも他に例はない。この他、カーボンナノチューブやグラフェンの励起子磁気光学効果などの精密物性測定も進めている。このように 100 テスラ以上の極限超強磁場環境の創出と精密物性測定では世界に他の追従を許さない絶対的地位を確保している。

破壊型超強磁場の近未来

一巻きコイル法では 100–200 テスラ領域での磁化測定等物性計測を広く共同利用に供したい。また、電気伝導測定等、物性測定の適用範囲を広げる努力も必要である。施設内の非破壊ロングパルスグループでの研究との連携も強化する必要がある。

最先端研究基盤事業次世代パルス最強磁場発生装置の整備(平成 22–23 年度)」の予算にて「1000 テスラ達成」研究プロジェクトが開始された。まずは、30 年以上使用された種磁場発生用副バンクを更新し、これまでの 10 kV, 1.5 MJ コンデンサバンクから 20 kV, 2 MJ にアップする。高い電源電圧により、より大きなインダクタンス負荷へのエネルギー投入が可能となり、初期磁場として現在 4 テスラ程度が限界であるが、将来 10 テスラ位を狙えることになる。強い初期磁場は磁束濃縮の最終段階でより大きな磁場ボアの確保を意味する。電磁濃縮法における発生可能磁場の上限を決める重要な要因の一つに、磁束を濃縮するライナーの速度があげられる。新規導入予定の装置ではこれまでの 40 kV の電源電圧から 50 kV へレベルアップする。これにより、ライナー速度を現在の 2.5–3 km/s から 4 km/s に上昇させ、1000 テスラの最高磁場を達成する見込みである。

1000 テスラ超強磁場では、磁気エネルギーが物質中の様々な相互作用や物性の決めてであるエネルギーギャップを超えることになる。更に、電子の波動関数の広がりやの指標となる磁気長が格子定数程度に小さくなる。1000 テスラでは磁気長は 0.8 nm 程度となり、固体の個々の原子ポテンシャルを伝搬する電子がまともに“見る”ことにより新現象発現につながると期待する。導入する主コンデンサバンクのエネルギーは 5 MJ と 2 MJ の 2 基であるが、新 5 MJ システムを主砲として極限最高磁場開発と物性計測技術開発並びにサイエンスを追求する。この 2 MJ 簡易型電磁濃縮法装置には 1000 テスラ磁場開発のためのプロトタイプの要素を持たせつつ、500 テスラ程度までの物性研究を推進するため、現在の一巻きコイル法レベルまでにその使いやすさを追求する。この 2 MJ システムでは、簡易な電磁濃縮法装置として共同利用による広い利用を期待している。これまでのニチコン社製 5MJ, 40 kV の電磁濃縮用電源は、2 MJ 分を残し、簡易型として使用できるが、100 テスラ程度で大きなボアが確保でき、しかも、磁場の上昇・下降過程の測定が可能な「巨大一巻きコイル」などの利用も考えられる。図 6 に電磁濃縮超強磁場発生実験室の近未来鳥瞰図を載せた。標題の「1000 テスラ」発生の実現は、新 5 MJ 電源システムの完成を待って、更に 1–2 年はかかることが予測され、2015 年度の実現を目指している。

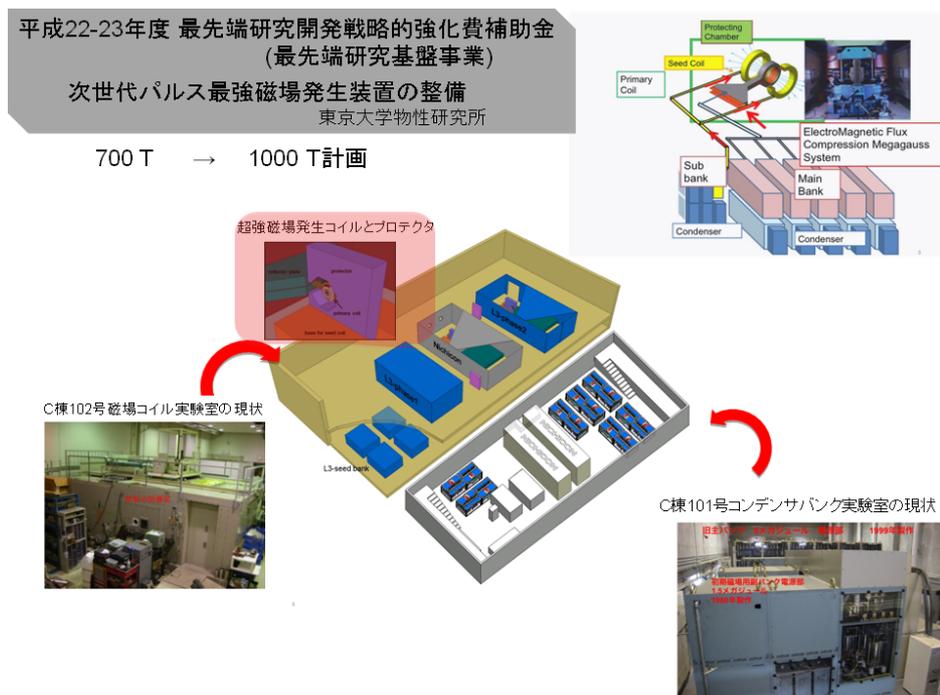


図 6. 文部科学省最先端研究基盤事業による 1000 テスラ計画と新規導入される設備の将来計画鳥瞰図。

非破壊型パルス強磁場の現状と将来

今後 10 年間のミッションは以下の通りである。

- ① 最大 60 テスラ、秒単位の長時間パルス磁場を発生する。この磁場を用いた精密物性測定を開発し、共同利用研究に供する。
- ② 非破壊 100 テスラのパルス磁場を発生し、ユーザーが気軽に使える 100 テスラを提供する。
- ③ 次世代強磁場科学を担う若手研究者を育成する。

これに対する現状を以下に述べる。

①長時間パルス磁場

現在は、60 テスラ、1 秒間の磁場を発生するための予備実験を行っている。予備実験において発生している磁場は 30 テスラ、0.5 秒間(図 7)であるが、来年度からマグネットの 2 号機(図 8)を投入して 45 テスラ、1 秒間の磁場発生を行う。

今年度、新たに開発された銅銀合金線は 4mm×6mm の断面積で引っ張り強度が 800~900MPa 程度であり、これを用いることで 60 テスラ 1 秒間のロングパルスマグネットを作製する。この磁場発生は 2014 年を予定している。

長時間パルス磁場の可能性は電源であるフライホイール付き直流発電機のエネルギーに依存しており、60 テスラ 1 秒間を発生するパルスマグネットが完成した後は 40 テスラ 5 秒間の超長時間パルス磁場の発生を目指す。この超長時間パルス磁場は後述する 100 テスラマグネットの外コイルとしての役割も果たす。

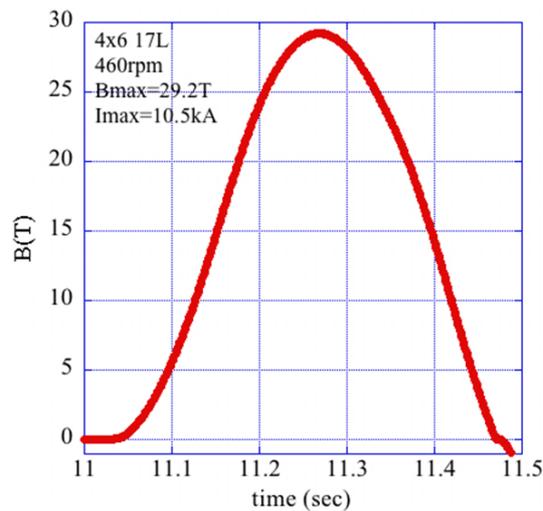


図 7. 4mm×6mm の平角銅線で作られた 17 層コイルによる磁場波形。ピーク磁場は約 30 テスラ、時間幅は約 0.5 秒にとどまっている。

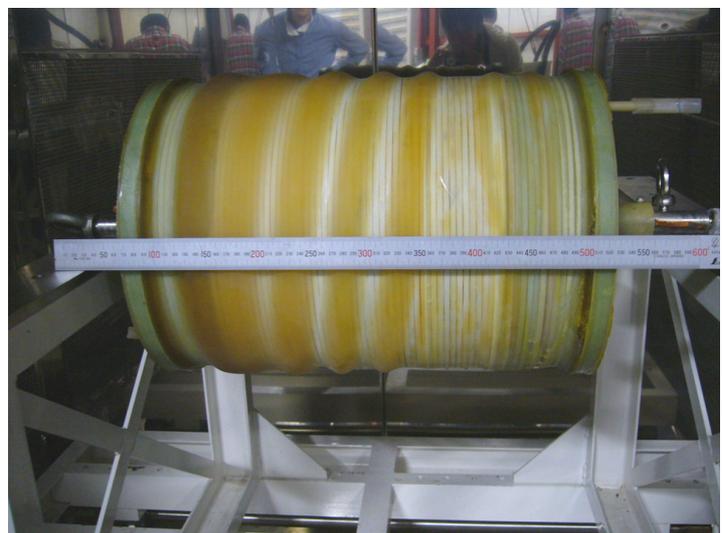


図 8. 45 テスラ、1 秒間の磁場を発生するマグネット。4mm×6mm の銅線を巻いた 26 層ボア径 27mm、マグネット外径 324mm、コイル長は 330mm でマグネットの長さは 450mm、重量は約 200 kg。この外側に補強リング(外径 400mm)をはめる。

②100 テスラマグネット

非破壊 100 テスラマグネットの開発は順調に進んでおり、今のところ、ショートパルスとして発生できる磁場は 87.7 テスラまで伸びている(図 9)。これは、内径 184mm の 11 層コイルに補強した 1 層コイルを内挿した二段パルスで達成した磁場ではあるが、11 層コイル単独の一段パルスで 85.8 テスラに達している事を考えると不十分な結果である(図 10)。今後は、一段パルスの磁場の上昇と内径の拡大を目指し、内挿コイルでの磁場を増加することで 100 テスラに近づく予定である。このタイプについても、新しく 2.5mm×4mm の銅銀合金線の開発に成功しており、間もなく試作コイルが完成する。90 テスラを越える磁場発生を 2013 年度内に行う事が当面の目標である。

非破壊 100 テスラは、ロングパルスマグネットによる 40 テスラの背景磁場中にショートパルスマグネットでの 60 テスラを重ねた 2 段パルスによって実現する。フライホイール付き直流発電機を用いた長時間パルス磁場計画とコンデンサ電源を用いたショートパルスマグネット計画の進展が結合する 2015 年頃には非破壊 100 テスラが現実のものとなると考えている。

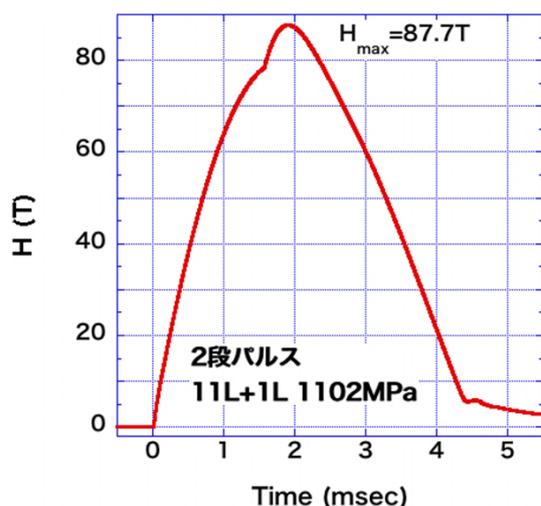


図 9. 2 段パルスで発生した 87.7 テスラの磁場波形。

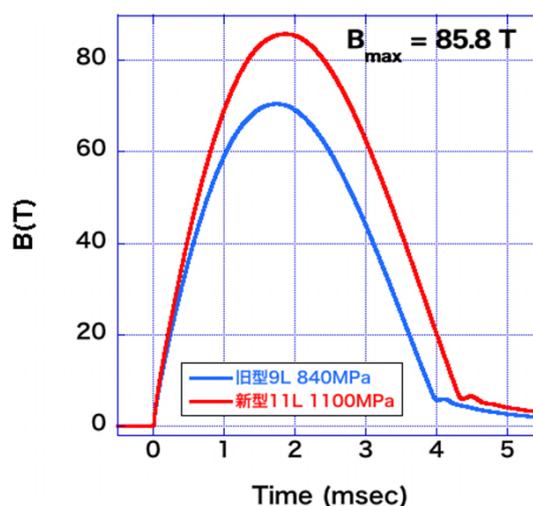


図 10. 新旧パルス磁場の比較。新方式マグネットでは線材強度のメリットが活かされており旧式マグネットの限界磁場よりも約 15 テスラ増加している。

③若手研究者の育成

若手研究者の育成は大事な問題ではあるが、明確な解決方法が見つからない問題でもある。特に、非破壊型パルス強磁場の分野は世界的な競争が激化しており、マグネットを含めた実験技術を開発できる若手研究者の育成が急務である。パルス強磁場にとってマグネット開発は必要不可欠である。開発を続ける意志があるからこそ新たな材料が見つかり、マグネットを更新する事が可能となる。もし維持するだけの技術であれば 10 年でマグネットの陳腐化は避けられず世界に取り残されてしまうであろう。物性研の強磁場および日本の強磁場科学が世界最先端を走り続けるためにも若手研究者を今から育てたい。

共同利用の現状

非破壊パルス強磁場はあらゆる研究者の共同利用に強磁場環境を供する事を重要なミッションと位置づけている。共同利用で使用可能な主なマグネットについては表にまとめられているが、この中で使用頻度の高いマグネットがショートパルスマグネットとミッドパルスマグネットである。ショートパルスマグネットは非金属の試料を対象とした測定に使われることが多く、これまで常用の磁場を 60 テスラ、特別な場合に 70 テスラまでを測定範囲として来たが、最近開発されたマグネットにより常時 75 テスラまでの測定が可能となった。金属的な試料を測定する時に利用されるのがミッドパルスマグネットであり、これは 60 テスラを常用として設置されている。現在、ミッドパルスを 70 テスラ常用とするべく開発が進行しており、近日中に更新される予定である。これらのマグネットを用いた共同利用は定常的に 70-80 件/年

の申請が出されている。今後はさらにロングパルスマグネットによる共同利用が加わることで件数も増大すると考えている。国際超強磁場科学研究施設のパルスマグネットとその用途については、表 1 にまとめたので、参考にされたい。

表 1 主たる磁場発生装置と仕様

	名称	タイプ	発生磁場	発生時間内径	電源仕様	使用	備考
C棟 101-113号室	電磁濃縮超強磁場発生装置	破壊	700 T	μ 秒 10 mm	5 MJ、40kV	光学測定 磁化測定	5 K-室温
	横型一巻きコイル超強磁場発生装置	破壊	300 T 200 T	μ 秒 5 mm 10 mm	0.2 MJ、 50 kV	光学測定 磁化測定	5 K-400 K
	縦型一巻きコイル超強磁場発生装置	破壊	300 T 200 T	μ 秒 5 mm 10 mm	0.2 MJ、 40 kV	光学測定 磁化測定	2 K-室温
C棟 114-120号室	ミッドパルスマグネット	非破壊	60 T	40ミリ秒 18 mm	0.9 MJ、 10 kV	光学測定 磁化 磁気抵抗 ホール抵抗 分極 磁歪 イメージング トルク 磁気熱量効果 比熱	5サイトで実験可能 最低温度は0.1 K
C棟121号室	PPMS	定常	14 T			抵抗 比熱	最低温度は0.3 K
	MPMS	定常	7 T			磁化	
K棟	ショートパルスマグネット	非破壊	80 T	5ミリ秒 18 mm	0.5 MJ、 20 kV	磁化 磁気抵抗	2K-室温
	ロングパルスマグネット	非破壊	30 T	0.5秒 30 mm	210 MJ、 2.7 kV	抵抗 磁気熱量効果	2K-室温

最後に

最後に、強磁場コラボラトリー計画の現状について述べたい。我が国における定常強磁場およびパルス強磁場研究施設が安定的に連携した運営を行うためには各拠点での電源と研究実施体制の整備が不可欠な状況となっており、その整備スケジュールをまとめている。整備事項の内、「長時間パルス磁場電源の移設」や「1000 テスラ磁場発生装置の整備」などの計画の一部は実施済みもしくは実施中であるが、これらに続く計画としてのマスタープランが学術会議に取り上げられている。オールジャパンで推進する強磁場拠点の整備は設備の整備にとどまらず若手育成を含めた研究者の整備が重要な課題であり、物性研究所の強磁場施設は中心的な役割を果たしていく覚悟である。欧米の巨大施設に対抗するためにはこれらの計画は必要不可欠であり皆様のご支援をお願いしたい。

物性研に着任して

附属極限コヒーレント光科学研究センター 軌道放射物性研究施設 宮脇 淳

2012年11月1日付で軌道放射物性研究施設 原田研究室の助教として着任いたしました宮脇淳と申します。勤務地は播磨分室で、SPring-8の東大アウトステーション BL07LSUを拠点として研究を進めてまいります。紙面をお借りして、研究経歴を記しつつ自己紹介させていただきます。

学生時代は、東京大学理学部化学科の太田先生に受け入れていただき、学部、修士・博士課程と過ごし、太田先生退官後の博士課程3年次は長谷川哲也研究室にお世話になって、博士を取得しました。この間、実験はKEK-PFで行っており、博士課程の時は多くの時間をつくばで過ごしていました。博士取得後は、理化学研究所 播磨研究所の研究者として採用していただき、SPring-8 BL17SUを中心に実験・研究を行って来ました。

学部の最初に与えられたテーマはX線吸収微細構造(XAFS)を用いたプルシアンブルー類縁体の構造解析で、4年生で研究室に配属されてすぐに、実験の勉強のため先輩について初めてKEK-PFに行きました。右も左もわからない状況だったのですが、放射光という巨大な施設を利用して実験を行うことに、漠然とながらも特別な印象をもったことをはっきりと憶えています。この時には放射光を利用して研究を続けていくとは思いませんでしたが、24時間の実験で体力的には辛いにもかかわらず、今や10年以上も放射光に携わって研究を続けており、自分の性分に合ったものに最初から出会えたことは幸運だったと思っています。その後、修士課程では、真空装置を改造して磁性薄膜のXAFSを測定できるようにし、博士課程では磁気円二色性(MCD)も活用して構造との相関も含めて金属薄膜の磁性に関する研究を行い、どっぷりと放射光を利用した分光法にはまり、今に至っています。研究での興味の対象が固体中のスピンへと固まっていったのもこの頃で、現在まで続く研究の方向性となっています。SPring-8では、軟X線を用いた角度分解光電子分光(ARPES)を新たな手法として、磁性薄膜の電子状態から電子のスピンを議論したり、円偏光を利用したARPESを駆使して、スピン状態の研究を発展させてきました。

硬X線、軟X線も含めたいくつかの分光手法を活用して物性研究を進めてまいりましたが、原田研着任にあたって、また新たに軟X線発光分光に挑戦するという機会を得ることとなりました。発光分光は、近年めざましい進展を遂げている注目の手法で、エネルギー分解能が100 meVを切って、様々な素励起を観測できるに至っています。BL07LSUには、原田先生が建設された超高分解能発光分光器がすでに稼働しており、多くの成果が上がっております。私は、電場・磁場下でも測定ができるという環境の自由度を活かして、電子状態、電子スピンの新たな研究を行うべく、装置開発を行い、物性研究の進展に貢献したいと考えております。自分の研究に加え、東京大学アウトステーションが共同利用実験施設としてより機能するよう、自分の技能を活かして施設の管理・運営にも貢献できればと考えております。どうぞみなさまのご指導ご鞭撻の程よろしくお願い致します。

物性研に着任して

附属極限コヒーレント光科学研究センター 渡邊 浩

2012年11月1日付けで極限コヒーレント光科学研究センター・末元研究室に特任助教として着任致しました渡邊 浩(わたなべ ひろし)と申します。紙面をお借りしまして簡単に自己紹介およびこれまでの研究紹介をさせていただきます。

私は京都大学理学研究科光物性研究室において田中耕一郎教授のもとで博士号を取得後、フランス レンヌ大学の Eric Collet 教授のもとでポスドクとして1年半ほど研究を行い、その後京都大学 iCeMS(物質-細胞統合システム拠点)で特定研究員として13ヶ月研究を行ったのち、2012年11月1日に物性研に着任いたしました。これまでの研究テーマは“光誘起相転移ダイナミクスの研究”で、主に有機錯体であるスピントロニクス錯体の相転移現象について研究を行ってきました。二価鉄スピントロニクス錯体(SCO)錯体は鉄イオンの周りに窒素原子が立方対称に配位しており、配位子場の強さにより $S=2$ の高スピン(HS)状態と $S=0$ の低スピン(LS)状態の2つの基底状態を持ちます。この2つの状態間のスイッチングを温度や圧力変化や光照射によって引き起こし、コントロールできることが知られています。この時 Fe-N 間の距離が変化することにより格子の大きさが変化し系全体の体積変化を引き起こし、さらに幾つかの物質では結晶群が変化する構造転移を伴うことが報告されています。この体積変化によって生じる格子歪みが閾値や孵化時間といった光誘起相転移現象特有の非線形な振る舞いに重要な役割を果たすと考えられています。こういった相転移現象は理論的な研究も精力的にされており、主に Ising-like model を用いた研究が行われてきましたが、これまではスピンと構造が同時に変化すると考え、主に一変数を用いた議論が行われてきました。私は相転移現象を記述するのは一変数では不十分であり、スピンと格子を別々に考える必要があると考え、いくつかの SCO 錯体において光誘起状態からのスピンと格子構造の緩和ダイナミクスをそれぞれ測定し相転移における両者の相互作用の果たす役割について研究を行いました。50K 程度の低温において光誘起照射によって作られた状態から緩和の緩和を測定すると、初期過程において格子構造は変化せずスピンのみが緩和していく様子が観測されました。格子はスピンの 8 割程度緩和して初めて緩和するという非線形な振る舞いを示します。このような電子系と格子系の緩和時間の違いは励起直後の振る舞いにおいていくつもの物質系で観測されていますが、それらの時間スケールはピコ秒からマイクロ秒ととても短いスケールで起きます。しかし私が観測した現象は秒から時間ととても長いスケールで起こり、50K において格子構造が緩和し始めるまでの孵化時間は 5 時間にもなります。そのため系の温度は熱平衡状態へと緩和しており、従来の熱力学を用いてその振る舞いを議論することができ、スピンと格子の 2 変数を用いた Ising-like model を使ってうまく実験結果を再現することができました。スピンドイナミクスに対応する光学測定や磁化率測定の実験は京大で行い、博士課程とその後のポスドク時にフランスの Rennes 大学において単結晶の X 線構造解析を用いて格子構造の緩和ダイナミクスを測定しました。また京大 iCeMS に特定研究員として赴任後は量子ドットのプリンキング現象の研究及びテラヘルツ領域における近接場光に関する研究を行ってきました。これらの経験・知識を基に、この物性研においては高強度のテラヘルツ領域の光の発生と行い、それ以外にも光電子分光や軟 X 線を用いて幅広い視点から光誘起相転移現象をはじめとした物性の制御について研究を行っていきたく考えています。また学生の教育活動にも精一杯取り組んでいきたいと思っておりますのでご指導ご鞭撻のほど、どうぞよろしくお願いたします。

物性研に着任して

附属物質設計評価施設 笠松 秀輔

2012年11月16日付けで附属物質設計評価施設、共同利用スーパーコンピュータ担当の助教に着任しました笠松秀輔(しゅうすけ)と申します。これまでの研究において、物性研のスパコンには大変お世話になってきました。このたび、使う側から「中の人」になり1ヶ月が経ちますが、このサービスを維持していくための物性研スタッフの尽力を目の当たりにし、その一員となった責任の重大さを実感しています。

私は大学4年に進学してから2012年の9月に博士(工学)の学位を取得するまで、東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻の渡邊・多田研究室でご指導いただきました。また、博士後期課程の1年目にソウル国立大学に3ヶ月間滞在する機会をいただき、Seungwu Han先生との共同研究で後述するシミュレーション手法の開発を行いました。博士論文の研究テーマとしては、異相界面の物性変調に着目し、主に第一原理シミュレーションを用いた解析を行ってきました。近年、材料同士の界面や表面における物性の変調、より具体的には電気(電子・ホール・イオン)伝導性や誘電応答、化学反応活性の変調が見いだされてきており、このような界面物性を積極的に活用することで、材料設計に革新をもたらすことが期待されています。しかしながら、このような物性変調のメカニズムやそれが制御可能であるか否かについては、充分明らかになっていません。このような背景を鑑み、私は博士課程において具体的な研究対象として(1)金属/イオン伝導体界面の空間電荷層効果と(2)金属/誘電体界面の誘電応答のシミュレーションを行いました。(1)に関しては、半導体でよく用いられるMott-Schottkyモデルと第一原理計算で得た熱力学パラメータを組み合わせることで、酸素ポテンシャルやバンドオフセットが界面のイオンキャリア分布に及ぼす影響を調べました。(2)に関しては、金属/絶縁体/金属構造にバイアス電圧を印加したシミュレーションを行うための第一原理計算手法を開発し、ナノスケールで顕著となる誘電物性(量子キャパシタンス、界面の誘電率低下、負の誘電率の発現など)について解析を行ってきました。

物性研では、杉野所員とディスカッションを行いながら、研究の対象を表面や界面の触媒反応に広げるとともに、新たな高精度第一原理計算手法の開発を行うことも検討しています。また、スーパーコンピュータ担当の助教として、特に第一原理計算を専門とする研究者という立場から、計算物質・材料科学を盛り上げていきたいと意気込んでおります。2015年には共同利用スーパーコンピュータシステムの入替えを予定しています。それに向けて、物性研究を発展させるのに適したシステムはどのようなものであるのかということ、最近の計算機技術の発展を念頭に置きつつ、物性コミュニティの皆様と一緒に考えていきたいと思っております。よろしくお願いたします。

物性研を離れるにあたって

東北大学多元物質科学研究所 佐藤 卓

2012年3月31日付けで物性研究所を退職し、同年4月1日付で東北大学多元物質科学研究所に異動いたしました。2004年3月31日に物性研に着任してから8年間お世話になった事になります。8年間本当に色々な方々にお世話になりましたこと、まずは深く御礼申し上げます。

さて、「物性研を離れるにあたって」には研究室の変遷を記載するのが通例のようです。しかし、実はこの時期に転出する事になるとは夢にも思わず、物性研日より2010年11月号に「研究室だより」として研究室の変遷を掲載して頂きました。それからまだ幾日も経っておらず新しいことがある訳ではございませんので、ここでは少し別の観点から拙文をまとめてみたいと思います。

私は中性子科学研究施設に所属しておりました。私の在職した時期は日本の中性子科学の環境が大きく変化した、いわば激動期であったと思います。パルス中性子の KENS(KEK)と定常原子炉中性子の物性研中性子施設は長く日本の中性子科学を支えてきた両輪でしたが、今世紀のはじめに世界最高輝度中性子源である J-PARC/MLF の建設が始まり、片輪 KENS はそれにとって代われようとしていました。丁度その時に、私は物性研に着任いたしました。J-PARC/MLF は最高出力が達成された暁には時間平均でも(ある条件では)原子炉以上の中性子束が予想されており、しかもそれが時間的にパルス状で発生されるのですから、ピーク中性子束では比ぶべくもありません。一方で、その時期国内のパルス中性子研究者は J-PARC/MLF の建設に忙しく、研究・共同利用どころではありません。従って、私が在任した時期の物性研中性子に課せられた任務は、1)パルス中性子不在時期に日本の中性子研究のレベルを落とす事の無いよう(むしろ J-PARC 時代に向けて更なる飛躍を遂げるべく)十分な科学的成果を挙げる事、2)国内の中性子研究者に絶える事の無く中性子散乱実験の機会を提供すること、更には 3) J-PARC/MLF 完成後の定常中性子源中性子散乱の未来を描く事であったと思います。もちろん当時ははっきりとこれらを認識していた訳では無いのですが、日々の仕事で直面する課題の多くはこれらに関連した事であったと思います。

さて、これらの課題は達成できたでしょうか？1)に関しては「研究室だより」に詳しく記しましたので皆様にご判断をお願いするところですが、甚だ自信がございません。しかしながら 2)に関してはある程度貢献できたのではと思っております。年間の半分は共同利用実験という状況が続き、この業務への対応はそれなりに大変ではありました。しかしその一方で、この共同利用という制度を通じて在任期間中多くの新しい研究にチャレンジする事が出来ました。これはおそろく普通の大学で研究室を構えていては経験できなかった体験だと思われれます。3)に関しては施設内外の方々と何度も議論を重ね、研究会もかなりの回数重ねたところですが、残念ながらまだ今後の課題と言わざるを得ない状況です。J-PARC/MLF の出力が 300kW 目前となった最近、J-PARC/MLF の威力をひしひしと感じます。この状況で原子炉中性子源にどのような本質的な有意点を見いだす事ができるか、これはなかなかの難問ですが逃げる訳には行きません。今後も引き続き議論して参りたいと思っております。

「研究室だより」以降の大きな変化としては、もちろん 2011年3月11日の大震災があります。当日私は海外出張で日本にはいなかったのですが、地震の知らせを聞き急遽戻りました。地震当日からメールや twitter で東海村地区の状況が刻々と伝わって来て、ちょっともう駄目かとも思ったものです。あの混乱した時期に最初に JRR-3 原子炉室やガイドホールの点検を行って下さった皆様には感謝以外の言葉が見つかりません。3月25日に震災後初めて原子炉内設置装置の点検に入室した際は、福島事故の事もありこれまで感じた事の無い感覚を覚えました。それにしてもあの時期は炉室

の外の方が中より線量が高かったんだと懐かしく思い出します。この頃は色々と混乱していた事もあって、殆ど会議等も無く、実は久しぶりにかなり集中して解析・論文作成が出来る時期でもありました。その後、比較的事態が落ち着きはじめた5月末から担当分光器(4G-GPTAS)の点検を始めました。点検初日に、なんと震災直前の2011年3月始めに修理していた箇所が再び壊れている事が判明し、意気消沈したのも今となってはいい思い出です。結局東海技術職員の皆様全員に加えて研究室総出で復旧に当り6月始めには修理が完了しました。それ以降、現在までJRR-3の再起動をただ待つばかりです。再起動にはまだまだ色々と困難があるかもしれませんが、しかし、これは研究用原子炉の意味を根本から考える良い機会でもあると思います。上記3)に答えを出さねばなりません。

外に飛び出してみてもしみじみ思うのですが、物性研は極めて恵まれた環境にあると思います。あえて誤解を恐れずに言えば、ほぼ同じ分野の40以上の研究室が同じキャンパスで活動しているわけですから、それだけで大きな力だと思えますし、強磁場、放射光、中性子の様な大型施設が身近にある事も極めて大きなアドバンテージだと思います。しかしもちろん飛び出すにはそれだけの理由がある訳で、その大きな一つには、大学の研究室でじっくりと次世代を担う学生と一緒に研究をしたいという思いがありました。また、コミュニティーを代表する物性研の部門・施設にあっては、その構成員である所員が研究分野の変更を伴うような大きな変化にチャレンジする事は難しいという点もありました。前者はおおよそ私個人の問題ですが、後者は物性研の今後を考える上で重要な問題ではないかと感じております。

「ぶっせいけんだより」を漢字変換すると、私のマックは長い間「物性研頼り」と変換しました。最近ようやく「物性研だより」と変換するように教えたのですが、そのとたんに転出が決まりました。外に出てみると、特に中性子散乱のようなビックサイエンス的物性研究は物性研共同利用無しでは成立しないことがしみじみと分かります。マックの漢字変換ももう一度「物性研頼り」に逆戻りです。物性研の共同利用が全国の研究者に(願わくば、一歩進めて全世界の研究者に)開かれた公正な競争を伴うものであり続ける事を希望しております。今後とも何卒宜しくお願い申し上げます。末筆ではありますが、物性研の皆様が世界の物性研究を牽引する存在であり続けますよう心よりお祈り申し上げます。

客員での研究の紹介

神戸大学大学院理学研究科 高橋 一志

2012 年度前期に客員准教授として物性研究所で再度お世話になりました。私は 2006 年 11 月より 2011 年 3 月まで森研究室の助教として在籍し、その間も物性研の皆様にご大変お世話になりました。この場をかりて御礼申し上げます。

今回の客員での研究は「新規外場応答型分子性物質の物性評価」というテーマで、これまで私たちが開発してきた双安定性を示す分子性物質の外場応答評価や分子性物質の極限条件下での物性評価を行うというものです。客員となったことがきっかけで新たな共同研究につなげることができたことに非常に感謝しております。研究自体はまだ始まったところで試行錯誤をしている段階ですので、結果を得るところまで至っておりません。そこで、共同研究の中でも田島先生にご協力いただいているスピנקロスオーバー伝導体の光応答性評価について物質開発の経緯を含めて紹介させていただきたいと思っております。

原子の種類と比べ、分子の種類は新分子の合成により日々着実に増えております。分子個々の示す機能性と、その集合化、集積化による機能性という観点から、分子性物質の多様性は想像がつかないほど広がっております。従って、分子性物質には他の物質系には見られない全く新しい物性現象や興味深い物性現象が存在するのではないかと期待して研究を行っております。現在、分子の電子状態設計と合成は、計算化学と合成化学の進歩から、狙い通りの電子状態を持つ分子の合成は、労力を惜しまなければ、ほぼ達成できる状態です。しかし、分子性固体の物性は、分子構造、分子配列ならびに分子間相互作用に強く依存するため、狙い通りの固体物性を示すバルクの分子性物質は、現在の技術を持ってしても合成してみなければわからないというのが実情です。

温度、圧力、光、磁場、電場などの外場に対する固体物性の応答を実現するためには、少なくとも二つの競合する相を持つ相転移を示す固体物質に対して、相境界付近で外場を作用させることで重要であることは周知の事実です。しかし、新物質開発、つまり化学の立場からは、このような相転移を示す分子性物質を一から設計して合成することは、前述の通り非常に難しいものとなっています。そこで、私たちは分子に特徴的な双安定性を利用して分子性固体の電子物性の相転移を誘起するというコンセプトで新たな分子性物質の開発を検討してきました。

このような分子の示す双安定現象のひとつとして注目したのが、スピנקロスオーバー現象です。八面体場に置かれた d^4 から d^7 の電子を持つ遷移金属錯体の電子配置には、配位子場分裂エネルギーとスピン対形成エネルギーとの大小関係から、フント則に従う高スピン状態とスピン対を形成した低スピン状態が存在します。このエネルギーが拮抗した状態において、温度、圧力、光などの外場により低スピンと高スピンとの間でスピン状態の変化が起こる現象をスピנקロスオーバーと呼びます。スピנקロスオーバーに伴い遷移金属錯体の磁性、色、分子構造が大きく変化するため、光磁性メモリやディスプレイ、分子スイッチング素子としての応用も期待され、近年注目を集めています。ところが、スピנקロスオーバーは遷移金属錯体の単分子における低スピン状態と高スピン状態との間の平衡現象です。相転移物質を開発するという観点からは、スピנקロスオーバーを示す分子同士が協同的に変化を起こさなければなりません。この協同性を実現するためにスピנקロスオーバー分子間の分子間相互作用に着目した物質設計を行う必要があります。

次に、どのような電子物性の制御を目指すかとなりますが、固体物質特有の性質という点で伝導性に注目しました。分子性導体の電子構造は比較的弱い $\pi-\pi$ 相互作用に基づいておりますし、圧力効果により多彩な電子相が出現することが良く知られています。さらに、分子性導体の伝導性は、一次元カラム構造もしくは二次元レイヤー構造が担い、電荷補償のための対イオンがサンドイッチされたような構造を取ります。そこで、伝導性の外場制御の第一歩として、外場により誘起されるスピנקロスオーバーの構造変化を「化学圧」効果として利用することが可能なことを示すため、対イオンとしてスピנקロスオーバーイオンを組み込んだ分子性導体の合成に取り組みました。幸い $\pi-\pi$ 相互作用による協同的スピン転移を示すことが知られている鉄(III)錯カチオンを含む金属ジチオレン錯体の部分酸化塩でスピנקロスオーバーと伝導性において同一温度でヒステリシスを示す世界初のスピנקロスオーバー伝導体を見出すことができました。

(Inorg. Chem. 2006)。ちょうど物性研に来る前のことです。私としては、金属錯体分子の構造変化のみで伝導性を 1 桁近く変化させることを成し遂げたのは驚きであり、臨界条件下での巨大応答より重要な意味を持つと考えております。その後、類縁体において化学圧効果のメカニズムを明らかにすることもできました(J. Am. Chem. Soc. 2008)が、やはり高伝導性を目指した物質開発をしたいと物性研に来た当初から考えておりました。

スピנקロスオーバーカチオンは通常分子性伝導体に含まれる対カチオンとしては非常に大きく、サイズの釣り合いを考えれば、より大きなアニオン性伝導体が良いと考えられます。当時、田島研助教の松田さん(現熊本大准教授)がいらして、巨大磁気抵抗を示す(TPP)[Fe(Pc)(CN)₂]₂ やその非磁性類縁体(TPP)[Co(Pc)(CN)₂]₂ といったフタロシアニン(Pc)系伝導体の物性を調べられているのを見聞きして、TPP(テトラフェニルホスホニウム)という非常に大きなカチオンを持ちながら高伝導性塩を与えるフタロシアニン系伝導体はスピנקロスオーバー伝導体にうってつけではないかと思いました。松田さんにお話ししたところ、すぐに原料の錯体 K[Co(Pc)(CN)₂]₂ をいただくことができ、早速合成を試みてみました。電解酸化によりあっさりと微小な単結晶を得ることができ、分子研の微小単結晶用 X 線構造解析装置を利用し構造解析に成功しました。ところが、その後単結晶をほとんど得ることができなくなり、MPMS での磁化測定も、伝導度測定もできず、結晶構造からもスピנקロスオーバーは示さないだろうという誤った予測をしてしまったため、しばらくそのままにしてしまいました。その後、森研の修士課程の佐藤さんがスピנקロスオーバー錯体の圧力効果について研究していたので、スピנקロスオーバーと絡みそうな伝導体の方が物性的に面白いだろうということで、再度結晶作製を試み、なんとか二端子法で伝導度測定ができそうなサイズの結晶を得ることができました。電気伝導度を測ってみると、半導体ではありますが、活性化エネルギーが小さく、80-120 K の温度領域でヒステリシスらしきものを観測し、その再現性も確認することができました。さらに少量ながら磁化測定を行い、磁化にも同一温度領域にヒステリシスがあることを確認しました。この時点で 3 例目のスピנקロスオーバー伝導体であることが判明したのです。その後、極低温での構造解析から水分子を結晶が取り込んでいることがわかり、それまで脱水溶媒を利用して電解結晶作製していたのですが、結晶成長がうまくいかない理由が明らかになりました。現所属に異動し、学部 4 年生で入ってきた袋井さんが様々な条件検討してくれた結果、比較的大きな(といっても 1 mm 程度の長さの針状晶です。)質の良い単結晶を得ることができるようになり、今回の田島先生との共同研究で得られた単結晶を使って光照射実験を行うことができるようになりました。

経緯が非常に長くなってしまいましたが、前期に行ったことは、まず極低温もしくは温度ヒステリシス領域で光照射によりスピン転移(LIESST)を誘起し、そのときの伝導度変化を測定してやることでした。しかし、熱膨張率の違いからサンプル位置が動いてしまい、光があたらない問題が明らかになりました。確実に光照射を行うことのために如何にサンプリングするか検討することで残念ながら前期の実験は終わってしまいました。その後、後期の共同利用の途中申請をご認いただいたため、継続して検討を行うことができ、サンプリングを工夫することでサンプル位置に関する問題を解消することができました。現在、光照射によるサンプルの劣化や端子部分の接着劣化、温度制御の困難な点が明らかとなってきたところで、まだまだこれからというところです。しかし、継続的に検討していくことでいずれ問題点は克服できるのではないかと楽観的に考えております。この間、田島先生には非常に多くの時間を割いて実験につきあっていただきました。厚く御礼申し上げます。

今回触れることができませんでしたが、溶媒分子に応答するスピנקロスオーバー錯体の物性測定の実験に関しては、森先生、上田さんと森研の学生さんに大変お世話になっております。また、現所属に異動して初めての学生である川向さんが見出した多核金属錯体に関しては、極低温下でキャパスタンスブリッジによる磁化測定を榊原先生と志村さんにしていただいております。今後さらに展開していくことができればと期待しているところです。このように多くの共同研究している皆様に御礼を申し上げます。最後に、客員としての機会を与えていただいた家所長をはじめとする所員の先生方にも感謝申し上げます。今回お世話になっている研究室以外の方々とも共同研究ができるような新しい分子性物質の開発を行っていきたくと考えておりますので、今後ともよろしくお願ひ申し上げます。

平成 24 年度客員所員を経験して

兵庫県立大学大学院物質理学研究科 山口 明

平成 24 年度前期に榊原先生にホストになっていただき、極限環境物性研究部門の客員所員として、物性研究所に滞在し研究をさせていただきました。私の専門は低温物理学で、期間中(H24 年 4 月~9 月)は極限環境部門の B 棟にある強磁場超低温冷凍機を使って実験を行いました。実を申せば、私は物性研超低温グループの旧石本研究室で助教として 10 年ほど物性研にお世話になってきた上、兵庫県立大に赴任してからも共同利用を通してこれまで何度もお世話になっています。なので、物性研の超低温装置の利用に関しては慣れていたつもりなのですが、ただ今回は、平成 20 年度末での石本先生のご退職、平成 23 年度末での久保田先生のご退職を経て、ついに超低温を専門とする所員不在の状況で、客員所員としての研究を開始しました。4 月の段階では幾分不安な面もあったのですが、榊原先生、上床先生を中心とする極限部門の方々の支援をいただき、また物性研究所からの援助もいただき、何不自由ない環境で実験をさせていただきました。特に煩雑な事務処理に関しては榊原研秘書の菱沼さんや共同利用係の方々に大変お世話になりました。実験では私と修士の学生との 2 名でお世話になることが多かったのですが、二人を代表して、お世話になった皆様に心からの感謝を申し上げます。

客員所員としての掲げた研究テーマは、超流動 ^3He の多重超流動相のなかの A_1 相と呼ばれる相における超流動スピンの流に関するものです。超流動 ^3He は p 波スピン三重項凝縮であるということがよく知られていますが、中でも A_1 相では凝縮体(超流体成分)がほぼ完全にスピン偏極して、スピン三重項の特徴が最も色濃く発現した相と言えます。超流動がスピン流と等価と見なせるので、超流体だけを選択的に通すスーパーリークを使ってスピンフィルタリングをすることが可能で、今回行った実験もスピンフィルタリングを使った「スピンポンプ」と呼んでいるものです。超流動 $^3\text{He}-A_1$ 相で満たされた容器の中にスーパーリークを備えた小さなスピン蓄積空間を用意しておき、スピンポンプを使ってスピンを蓄積させると、高偏極の超流動状態が実現できる可能性があり、それに向けた実験を行いました。液体 ^3He は核スピンを持つフェルミ縮退した系であり、超伝導磁石を使った単純な磁場印加では高偏極を得るのが難しいとされています。これまで超低温物理学で謎とされてきた、高偏極超流動状態の解明に迫るといのがこの実験の最大のねらいです。

A_1 相の実験は、石本研在籍当時から行っているもので、かれこれ 9 年目になりますが、2 年ほど前にスピン蓄積実験の最初の目途を付けた後、実験の大きな転回を図ろうと考え、技術的に 2 つの新しい手法を試すことを決意しました。1 つはスピンポンプのアクチュエータの改良です。それまで静電力により数マイクロメートルしか動かせなかったアクチュエータを液体 ^3He の圧力を駆動力にしたアクチュエータに変えることで数百マイクロメートル程度まで大きく動かせるようにするもので、高偏極状態の実現に不可欠と考えました。幸い、この改良は昨年、共同利用実験を通じで無事に行うことに成功しました。今回行ったのは、2 つ目の新しい手法のテストで、具体的にはスーパーリークの改良となります。先にも述べたようにスーパーリークはスピンフィルターとして働く本実験手法の要となる部品で、その性能が大変重要になります。求められるのは大量の超流体成分を瞬間的に流しつつ、常流体成分をブロックする能力も高いという性質で、ある意味で矛盾した要求を満たしてやらなければなりません。これまでも、数 μm のアルミ箔をエッチングして作成したスリット型のスーパーリークや、孔の径が数 μm ガラスのキャピラリーが数千本束ねられたガラスキャピラリーアレイというものなど、様々な工夫を凝らしてきましたが、さらに高偏極度を得るために微粒子を油圧プレスで圧縮した粉末型のスーパーリークを試すことにしました。実験ではアルミナの粉を充てんした Packed Alumina Powder Superleak (PAP-Superleak) というものを作成して、スピンフィルターとして働くかどうかを検証しました。粉末型の利点は、スリットや穴に比べて同じ空孔率でも常流体成分を止める能力が高いところで、より高偏極状態の生成に有利であると期待できます。超流動 ^4He を使った熱噴水効果のデモ実験ではよく見かけるものですが、超流動 ^4He と比較してコヒーレンス長の長い超流動 ^3He ではあまり使用された例がありませんでした。今回の実験では、PAP-Superleak が超流動 ^3He でもスーパーリークとして確かに働くことを実証でき、確実に実験を進めることができました。同時に問題も見つかり、粉の

充填率が大きいと超流動性が抑制されてしまうという結果が得られました。これは、より大きな径を持つ粉末粒子を充てんすればよいと考えられ、今回の結果を踏まえて最適な条件出しを現在行っています。

以上の実験は、通常、超低温(2mK 程度)、強磁場下(数テスラ)の複合極限環境下で行われました。このような環境下での実験は、兵庫県立大学のような小さな大学では設備の面からも難しく、物性研の世界的に見ても優れた装置を共同利用として使用させていただけるのは大変ありがたい限りです。しかしながら、特に今回客員所員を経験させていただく中で、大型施設の維持管理には様々な方の尽力があるということを改めて認識し直しました。今後、共同利用として装置を使わせていただく際にも、今回得た経験を忘れることなく、感謝の気持ちを持って、最高の研究成果を上げられるべく努力したいと思います。

最後になりましたが、物性研究所の皆様には、昨年の東日本大震災からの復旧時、および今年 9 月の液体ヘリウム再凝縮器の大きな故障の際に、超低温共同利用に関して温かいご理解と、迅速かつ十分なサポートをしていただきました。超低温研究に携わる者として衷心より感謝申し上げます。

一客員所員の夢

岡山大学大学院自然科学研究科 小林 達生

国際超強磁場科学研究施設の松田康弘さんに声をかけていただいて、平成 24 年度前期に、客員所員として共同研究を行いました。研究テーマは「超強磁場で誘起される強磁性酸素の探索」です。

酸素分子 O_2 はスピン量子数 $S = 1$ の磁性分子です。固体酸素には三つの相がありますが、すべて分子間の相互作用は反強磁性で、最低温では反強磁性秩序状態です。そもそもの研究の始まりは、15 年前に、金属錯体のナノ細孔中に酸素分子を並べて、「やわらかい」ハルデンギャップ系を作ろうと思ったら、一次元系特有の直線的な磁化過程ではなく、一段のメタ磁性が観測されたことでした。¹⁾ その後、他の多孔性錯体で O_2-O_2 ダイマーができていることが明らかになりましたが²⁾、 $S = 1$ ハイゼンベルグ反強磁性ダイマーモデルでは二段のメタ磁性になるはずで、これでも説明できません。いろいろ考えているうちに、「強磁場では、 O_2-O_2 ダイマーの分子配列が変わって、磁化が飽和しているのではないか？」ということに気がきました。³⁾ 酸素分子間の磁氣的相互作用はファン・デア・ワールス力と同程度なので、分子の凝集・配列に磁氣的相互作用が決定的な役割を果たしているのです。強磁性スピン配列のときの安定な分子配列が、反強磁性配列の場合の分子配列と異なることは、いくつかのグループで第一原理計算により示されています。私たちはこれを考慮することにより、帯磁率の温度変化と磁化過程を説明することに成功しました。 O_2-O_2 ダイマーでは、磁場誘起分子再配列が起きているようです。

ということは、固体酸素でも超強磁場を加えて、磁化を飽和させると異なった分子配列が実現することが期待されます。バルクでは構造相転移が起きるでしょう。1980 年代に伊達研で実験されて、60 T までの磁場ではメタ磁性的振舞いは観測されていませんから、ワンターンコイルを使った 100 T を超える磁場が必要です。あとは、1 マイクロ (μ) sec 程度のタイムスケールで構造相転移が起きるかどうか・・・、神に祈るしかありません。

1987-88 年に、はじめて天谷先生(当時のボス、客員所員)に強磁場実験に連れてきていただきました。当時、パルス磁場実験の圧倒的な迫力に、物性研究の夢(+困難)を感じたことを鮮明に覚えています。超強磁場で何かやりたいと思って、25 年も経ってしまいましたが、「強磁性酸素」の発見が今の夢です。

この共同研究では、松田さんと M2 の野村君、嶽山先生にお世話になっています。厚くお礼を申し上げます。また、この 10 年来「ナノ細孔に吸着した O_2-O_2 ダイマーの磁性研究」を共同で行ってきた、金道さん、松尾さんにも感謝いたします。これからもよろしく願います。

参考文献

- 1) W. Mori, T. C. Kobayashi, J. Kurobe, K. Amaya, Y. Narumi, T. Kumada, K. Kindo, H. A. Katori, T. Goto, N. Miura, S. Takamizawa, H. Nakayama, K. Yamaguchi, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **306**, 1 (1997).
- 2) R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, T. C. Kobayashi, K. Kindo, Y. Mita, A. Matsuo, M. Kobayashi, H.-C. Chang, T. C. Ozawa, M. Suzuki, M. Sakata, M. Takata, *Science* **298**, 2358 (2002).
- 3) T. C. Kobayashi, A. Matsuo, M. Suzuki, K. Kindo, R. Kitaura, R. Matsuda, S. Kitagawa, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 271 (2005).

研究室だより

川島研究室

附属物質設計評価施設 川島 直輝

はじめに

2004年8月に物性研に着任してから8年あまりが経過した。とてもそのような実感がわかなくて困るが、おそらく年齢が上がるにつれて、脳が単位量(どのように定量化するかはそれ自体面白い問題だが)だけ変化するのに必要な特徴的時間スケールが延びていくせいであろう。土三日あわざれば刮目して見よというから、心得のある人は年齢にかかわらず脳が日々変化しているのであろうが、残念ながら私の脳の特徴時間は増加傾向にあるようだ。むしろ刮目すべきなのは、研究室の若い人たちであり、半年前と同じ人だと思って向かっていると思い違いであることにしばしば気づく(さすがに三日の違いにはなかなか気付かない)。このたび、研究室だよりという形でこれまでの研究室のアクティビティを紹介する機会を与えられ、過去8年間を振り返ってみると、我々の成果の多くが、そんなふう私に勘違いしているまさにその部分から出てきているように思われる。以下、我々の活動のなかからいくつかをピックアップして他の場では書く機会のない苦労話風の要素も交えて紹介してみたいと思う。



図1: 研究室の集合写真(2012年春)。向かって左から押川、桐井、大越、兼子、筆者、渡辺、大久保、正木、光富(敬称略)

量子臨界現象

量子ゆらぎが強く、相関長が発散し、励起ギャップがゼロになるような状態、すなわち量子臨界現象が盛んに研究されている。そのような状況にある系はしばしば外場に対して大きな応答を示すので、応用的な観点からも興味を持たれるが、一般論としても強い関心もたれている。経路積分表示で d 次元量子系を $d+1$ 次元古典系にマップできることはよく知られており、多くの教科書では量子臨界現象を $d+1$ 次元の古典臨界現象に等価であると書いてある。もちろんその見かたは第1近似として正しいわけで、3次元の世界に住みながら4次元の世界で起きる現象に実際に触れることができるというだけでも大いに好奇心をそそられる。しかし、理論家は日常的に次元を勝手に変えて考える癖がついているので、4次元にはもともとなじみがある。繰り込み群的な観点からはむしろ3次元の方が難しく、4次元のほうが3次元の議論をするための出発点として使われるくらいであることは、修士課程の学生であれば知っている。なので、量子臨界現象

とは $d+1$ 次元の「普通の」臨界現象だといわれるとややがっかりすることになる。しかし、そう単純でない場合の可能性が「脱閉じ込め転移」というキーワードのもとに議論されている。[1] すなわち量子力学的な機構がなければ(高次元でも)存在しないはずの臨界現象の可能性である。

我々のグループはもともと最初からそのような臨界現象を追求していたわけではない。むしろ、「普通の」2次元量子スピン系だけを扱っているとなかなか実現できないスピン液体相あるいは磁気無秩序相を、なんとか実現するモデルはないかを考えていた。フラストレートしたスピン系がまずはそのような系の候補であり、対応する磁性体もあり得るので、物理の問題としては王道なのだが、技術的な制約から2次元フラストレートスピン系を量子臨界現象まで論じられる精度で計算することは不可能である。そこで我々はまずはモデルについては妥協して、現実の物質としての実現可能性が低くてもよいから、磁気無秩序相を示すモデルを考えることにした。実現可能性を犠牲にした以上は、モデルとしてはできるだけシンプルな方がよい。そのような事情で我々が研究のテーマにえらんだのが、通常は $SU(2)$ 対称性を持つハイゼンベルクモデルを $SU(N)$ 対称性に一般化した $SU(N)$ ハイゼンベルクモデルだった。京都大学の原田健自氏、ETHの Matthias Troyer 氏とともに開発を進めていた量子モンテカルロ法の新しいアルゴリズムであるループアルゴリズムがうまく使えそうな問題であったことも理由の一つである。また、2004年の段階では、 $SU(4)$ モデルがスピン液体相であるという先行研究があったことも刺激になった。

ループアルゴリズムによる量子モンテカルロ法は予想どおり非常に収束が速く、従来法では到底計算できないサイズの統計誤差を除けば厳密な計算を行って、その統計誤差も十分に小さくすることができた。この結果、先行研究で基底状態がスピン液体相であると主張されていた $SU(4)$ モデルには非常に小さいが有限のネール秩序が存在することが分かり、かつ、 $N=5$ 以上の $SU(N)$ モデルでは、ネール秩序が消失することが分かった。[2] $N=5$ 以上の $SU(N)$ モデルの基底状態の性質を明らかにするために、当時大学院生だった田辺勇太君にさまざまな物理量を測ってもらうことにした。物性研の共同利用スパコン SGI Altix 3700/1280 を使った計算はうまくいき、基底状態は磁気無秩序相ではあるがいわゆるスピン液体相ではなく、空間的並進対称性と回転対称性が自発的に破れた valence bond solid (VBS) 相であることも分かった。[3] この結果は $1/N$ 展開による解析的な近似計算からも予想されており、それで一件落着かと思ったのだが、田辺君がある日、奇妙な絵(図2右)を持ってきたことで、再びわけがわからないことになってしまった。

この図は2成分秩序変数(D_x, D_y)の分布関数であり、 D_x は x 方向の最近接スピン間相関関数の非均一性を表しており、これがゼロでないことは x 方向の並進対称性が破れていることを表している。 D_y も同様である。たとえば、基底状態が無秩序相であれば、原点に重みが集中するはずである。また、基底状態が図2左のようなVBSパターンであるとすると、 $D_x \neq 0, D_y = 0$ であるので、図2右の x 軸上の原点以外の場所の重みに寄与することになる。 x 方向と y 方向はもともと等価なので、期待される秩序変数分布は $D > 0$ を秩序変数の絶対値として、 $(\pm D, 0), (0, \pm D)$ の4点に集中するはずであった。しかし実際に田辺君が持ってきたのは図2右にあるような円周上にほぼ一様に分布する形であり、そのような分布が出現する理由はもともと正方格子上で定義されているモデルが持っている対称性からは出てこないものである。四角いものからなぜか丸いものが生まれたわけである。

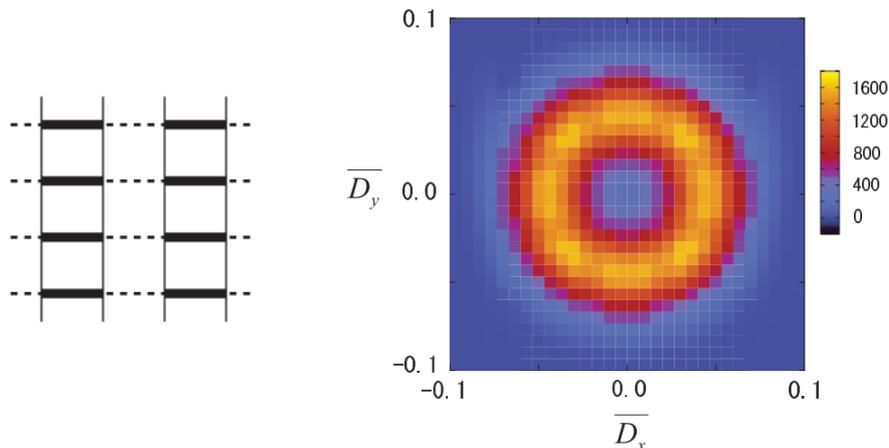


図 2: (左) $SU(N)$ モデルの基底状態で実現する VBS 状態のパターン。線が太い場所ほど隣接スピンの相関が強いことを示す。(右) $SU(6)$ ハイゼンベルクモデルの秩序変数分布。[3]

いろいろ頭をひねったり調べ物をしたりした結果、この理由は今では以下のように理解されている。すなわち、SU(N) モデルに量子ゆらぎをコントロールする仮想的なパラメータ Q を導入して、このパラメータを含むより広いモデルの空間内で考えると、有限の Q の値に「丸い」量子臨界点がある。つまり、この量子臨界点においては、格子の離散性や非等方性は irrelevant な摂動になっている。しかも、臨界点での Q の値は小さく、 $Q=0$ の場合に対応する普通の SU(N) モデルは、真に臨界的ではないものの、「丸い」臨界点での性質に近い性質をもつ。とくにシステムサイズが小さい有限系では、格子の非等方性は近似的に消失する。この説明は、いろいろな要素を実際の観測事実にあうように後付けで都合よく寄せ集めたもの聞こえるかもしれないが、「丸い」臨界現象が存在するという事は、一般的な議論から我々の計算に先立つこと3年前に予想されていたことであった。[1] ただし、これは場の理論に基づく一般的な議論であったので、それがどのような格子モデルで実現されるか、とくに、SU(N) モデルで近似的に実現されるかどうかまでは我々の計算以前には分かっていなかったことである。ここで登場した「丸い」臨界現象は、脱閉じ込め臨界現象と呼ばれている。

この脱閉じ込め臨界現象の特徴の一つは、それが質的に異なる対称性を持った二つの相を分けるということである。すなわち、磁気的対称性が破れたネール状態と空間的対称性が破れた VBS 状態との間の二次転移として起きる。つまり、どちらの相がより高い対称性を持っているとは言えないわけで、これは統計力学の教科書にでてくる標準的な二次転移のシナリオ、すなわち、自発的対称性の破れのシナリオに反している。それを可能にするのが量子系に特有なベリー位相の効果であると考えられており、最初に述べた単なる $d+1$ 次元の「普通の」臨界現象ではない量子系に特有な臨界現象という話に戻ってくるわけである。

ただし、この脱閉じ込め臨界現象については、そもそもそのようなものは存在せず、一見存在してみえる場合も実は非常に弱い一次転移ではないか、という議論がある。[4] この議論は脱閉じ込め臨界現象を起こすことが期待されている連続場のモデルに関する数値計算に基づいており、説得力がある。しかし、非常に弱い一次転移と二次転移を数値計算で区別することは原理的に難しく、仮に二次転移説が正しいとすると、一次転移の特徴である物理量の有限の飛びがないことを有限系の数値計算でいくら示したとしても、転移が二次転移であることを示す決定打にはなりえない。すなわち、この問題に決着をつけるためには、何か「ない」ことではなく、脱閉じ込め臨界現象のシナリオから予測され一次転移説では説明できないような何かしらの特徴が「ある」ことを示さないといけない。

そのために我々が試みたことは、脱閉じ込め転移が期待されるあるモデルに関して、SU(N) の N を系統的に変化させ、それが脱閉じ込め転移のシナリオと $1/N$ 展開に基づく臨界指数の予測値に漸近的に近づいていくかどうかを調べようということであった。実際に考えたモデルは、これまで述べてきた SU(N) ハイゼンベルクモデルに(普通「 Q 項」と呼んでいる)4 体の相互作用を付け加えた SU(N) J-Q モデルである。この計算はボストン大学教授で物性研客員も務められた Anders Sandvik 氏のもとで学位を取り、その直後に我々の研究室にポスドクとして加わった Jie Lou さんが行った。実は当初はそれほど明確な目的意識があったわけではなく、 N が大きな場合もやって、脱閉じ込め転移を示すエビデンスを補強しようと考えた程度であったのだが、実際に得られた結果は脱閉じ込め転移のシナリオに基づく解析的な議論から導かれる定量的な予測とコンシステントであることが分かった。[5] たとえば、秩序変数の臨界点でのべき的減衰を特徴づける指数である η_D を N の関数としてプロットすると、図 3 に示すように、 N が ∞ の極限で、うまく $1/N$ 展開の予想値(図中の赤い丸)に近づいていくように見える。ただ、今のところ「そのようにも見える」という域を脱しておらず、臨界指数の値自体の不確かさが大きいことから、現在この計算をより大規模に行うことで、この問題を最終的に解決しようとしており、これは京コンピュータを用いて行う戦略課題の一つとなっている。

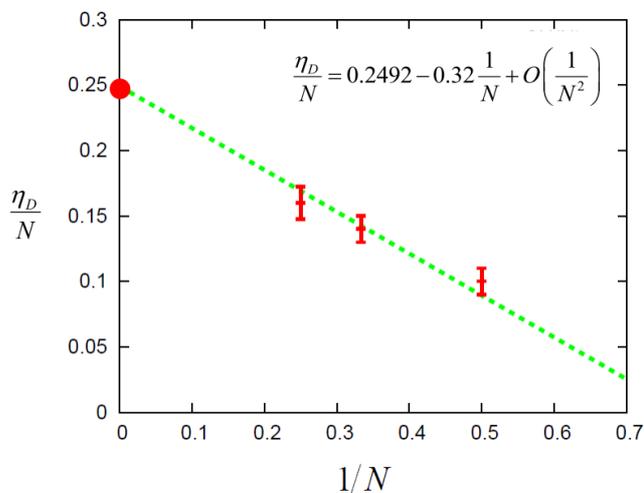


図 3: SU(N) J-Q モデルにおける秩序変数の相関指数。赤い丸が $1/N$ 展開から予測される $N \rightarrow \infty$ における厳密値。点線はこの値を仮定した線形フィット。[5] のデータに基づく。

新しい計算手法

このように、我々の研究室では、一方では物質よりも現象に重点を置いて、非常に単純化されたモデルの大規模数値計算によって新しい臨界現象の可能性を追求してきているのだが、もちろんこれをゆくゆくは現実の物理系で実現、観測したいわけである。可能性としては、フラストレート磁性体などが以前から議論されているが、臨界現象などを議論するには大きな系を近似なしで扱う必要があり、従来の理論計算手法では手の出ない問題となっていた。そのような状況を打開するための新しい方法論として期待されているのが、テンソルネットワークの方法である。

テンソルネットワークの最も簡単な例は 1 次元の場合の行列積状態として古くから知られており、近年 1 次元量子系の問題に対して盛んに用いられている密度行列繰り込み群法もこの行列積状態を使った変分法であるからテンソルネットワーク法の一つといってよい。(ただし、密度行列繰り込み群法では、1 次元的なネットワークしか考えないのに対して、一般のテンソルネットワーク法では、扱う問題の格子形状などに応じてさまざまなネットワークを考える。)ごく最近では密度行列繰り込み群法を有限幅の帯状の 2 次元問題に力づくで応用する試みもあり、かなり成功しているものの、計算量が帯の幅の指数関数で増大するため、このやり方をどこまでも推し進めることができないことは明らかである。

我々は 2008 年ころからテンソルネットワークによるフラストレート系の計算の可能性を検討してきた。テンソルネットワークによる計算に必要な計算量は実際にはかなり大きいのだが、システムサイズ依存性はあっても指数関数より緩やかであることが期待されている。したがって、現在はまだ他の方法に比べて明確に優位でないとしても、計算機やコーディング技法の向上などによってターゲットとなる系のサイズが増大するにつれて優位になりうる方法なのである。プログラム作成も含めて検討作業の中心になったのは、京都大学の原田氏で、そこに、ポスドクとして物性研に着任したばかりの Lou さんと当時物性研助教だった鈴木隆史さん(現兵庫県立大)が関わった。(私はただ脇からもっともらしいコメントをするだけの役割である。)

コーディングが複雑である上、漸近的には有利であるという予想はあるにしても、実際の有限サイズでの計算の計算量は大きく、かつネットワークの取り方やテンソルの次元の設定に任意性がある、まともな計算ができるようになるには非常に苦勞を要した。(この苦勞も私がしたのではないが。)今年になってようやくその苦勞が実り始め、2 次元フラストレート量子スピンモデルでいくらか結果をだすことができるようになった。[6] 最初に選んだケースは物質設計評価施設の上田研で合成された $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ が代表するシャストリ・サザランド格子系である。[7,8] シャストリ・サザランド格子は、図 4 に示すようなものであり、 J'/J が重要なパラメータである。このパラメータが小さい場合には、図中で斜めのボンドのところにシングレットペアが形成される非磁性シングレットダイマー状態となる。モデルでこのパラメータを大きくしてやると、あるところで VBS 状態が出現し、さらに大きくすると通常の反強磁性秩序が出現することが予想されている。我々は、これらの転移点の場所を決定し、さらに、磁場下で Sz 成分が超格子構造を組んだままトリプレット励起が凝縮する、トリプレット励起の「超固体」状態というべき状態があることを示唆する結果を得た。また、いまのところ我々の計算では、中間的な VBS 状態と反強磁性秩序相との間の相転移の詳細を明らかにするには至っていないが、こ

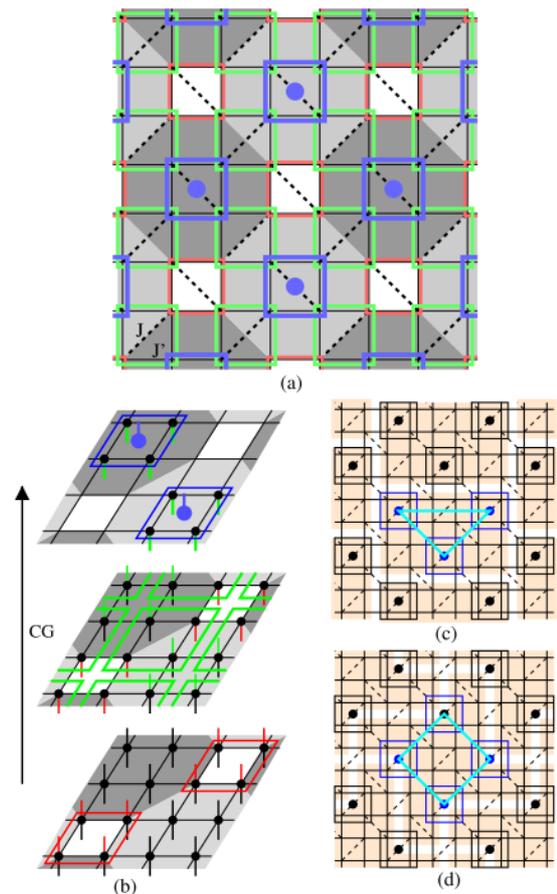


図 4: シャストリ・サザランド格子 (上) とテンソルネットワーク。正方格子を構成する結合 J' と、斜めの点線であらわされる部分の結合 J から構成される。[6]

の転移が脱閉じ込め転移の例になっているだろうという予想もある。[9] 実際の物質ではパラメータをそれほど自由に变化させることはできず、普通に磁性体として実現されるのは、このパラメータが比較的小さくて孤立ダイマーの集団として見る事ができる場合に対応していると言われている。とはいえ、現実の物質が VBS 相に近いところにあり、その先に様々な量子相が予測されているというのは、有用な知見だと思う。

従来、近似なしでは大規模系の計算が不可能であったフラストレートスピン系やフェルミ系が近似なしに計算できるようになれば、脱閉じ込めの問題や超固体に限らず様々な現象の理解が進むに違いなく、インパクトは非常に大きい。もちろん、新しい方法というのは、まだ限界が良く分かっていないというだけで、早晩重大な問題点が露呈するという事もありえるので、過剰な期待は禁物かも知れない。しかし、もしかすると自分が手にしかかっている方法論が多くの「開かずの扉」を開く鍵になっているかもしれないという期待は非常にわくわくさせられるものである。

計算科学を取り巻く研究環境

理論物理は長らく一人ひとりの研究者単位で研究を実行し、結果をだすことのできるスモールサイエンスであったが、計算機を利用した理論物理はビッグサイエンスになりつつある。ハードウェアに関しては、スーパーコンピュータを使おうとする限り、一研究グループの予算ではどうしようもない。また、近年は、ハードウェアだけでなく、ソフトウェアの面からも、分野によってはゼロから自前のコード開発をしていては最先端の研究がしがたくなっているようなものもある。加えて近年の計算機は高並列性によって速度向上を実現しているために、多少でも性能向上のご利益を得たければうまく並列化するようにプログラムを(場合によってはアルゴリズムにまで立ち返って)改良しなければならない。計算機を利用する研究者のグループとして、我々も計算資源の確保と、システムソフト・開発環境からアプリケーションソフトウェアまでを含めたソフトウェア資源の充実に無関心ではられない。研究環境の維持と向上のためには、どうしても組織的な取り組みが避けられないのである。

物性研究所は京コンピュータの活用プロジェクトでもある文科省「HPCI 戦略プロジェクト 分野 2(新物質・エネルギー創成)」を担う大学・研究所間連携組織である CMSI の中核拠点となり、我々のグループ自体も、物性研の藤堂グループ、東大理学部の宮下グループ、首都大の岡部グループとともに CMSI 内にひとつの研究ユニット(QMC グループ)を形成して戦略課題の一翼を担っている。上でもすでにいくらか述べたように、これまでは量子モンテカルロ法を利用した新奇量子相・量子臨界現象の探索と解明を行ってきたが、2013 年度からは、テンソルネットワークなどの新しい計算手法を応用して、スピンと軌道自由度の結合した系における量子現象を解明する計画を立てているところである。具体的な活動としては、月例の QMC グループの勉強会・研究会・打ち合わせ会合を柏と京コンピュータのある神戸で交互に開催している他、関東と関西に分かれたグループメンバがたがいに頻繁に行き来している。

おわりに

我々のグループでは、ポスドクや大学院生の諸君がたがいに少しずつ関連のある研究テーマについて各自の創意に基づいて研究を進めている。本稿全体が列挙的になってしまうのを避けるために、それらをすべて網羅することはしなかったが、それぞれに興味深い成果をあげているので、展望にかえて最後に少々列挙してみたい。

量子スピン系のシミュレーションと物理の上でも手法の上でも重なるところの多いボーズ凝縮系、とくに冷却原子と光格子に関して言えば、加藤康之君(現ロスアラモス)が行った大規模ボーズハバードモデルのワーム更新法シミュレーションによる運動量分布関数の計算、佐藤年裕君(現常次研ポスドク)と加藤君による有限温度 Gross-Pitaevski 方程式の精度評価、大越孝洋君と鈴木隆史さんによるソフトコア双極子相互作用のある系における超固体の立証、ポスドクの正木晶子さんによるワーム更新法の並列化の試み、などがある。現在は冷却原子系や He 系の実験と直接対応づけながら研究を進める方向を模索している。

古典スピン系のシミュレーションに基づく成果としては、紙屋佳知君(現ロスアラモス)は在学中から鉄系超電導体の母物質における構造相転移と磁氣的相転移の間の関係について、有効古典スピンモデルの数値計算に基づく共同研究をロスアラモスの Cristian Batista 氏と進め、ロスアラモスに移って間もなくその成果をまとめて公表した。また、大学院生だった田村亮君(現物質・材料研究機構)は物性研中辻グループによる三角格子 S=1 反強磁性体 NiGa₂S₄の研究結果に触発されて始めた古典ハイゼンベルクモデルの数値計算において、空間対称性の破れを伴う 1 次転移を見出した。最近では、

新たにグループにポスドクとして加わった大久保毅さんが大学院生の兼子裕崇君と Z_2 トポロジカル転移を示すことが期待されている古典スピン系の大規模並列計算を進めている。

テンソルネットワークと関連したところで一例を挙げるとすると、ポスドクの田中宗さん(現東大理)と Lou さんは学習院大の桂法称氏との共同研究において、テンソル積状態の一種である 2 次元 AKLT 状態のエンタングルメントスペクトルが 1 次元量子系に対応していることを数値的に立証した。テンソルネットワークに関しては、多様な量子多体問題解明に対するブレイクスルーをもたらすことが期待されていることは上に述べたとおりであるが、数値解法としてだけではなく、量子多体状態の分類の上でも重要な役割を持っているようである。

年度	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	
助教	鈴木隆史(兵庫県立大)						松田佳希		渡辺宙志 ^{*1}	
							富田裕介 ^{*1} (芝浦工大)			
客員			←岡部豊(首都大)				←Dimo Uzunov (Bulgarian Academy of Science)			
			←Anders Sandvik (Boston U.)				Yan Chen (Fudan U.) →			
PD	Tasrief Surungan (Hasanuddin U.) →				田中宗(東大理)				正木晶子	
							Lou Jie (Fudan U.)		大久保毅	
学生	塚本光昭 ^{*2} (ATR脳情報通信総合研究所)			大越孝洋						
			←安藤和人 ^{*3} (地球シミュレータセンター)				兼子裕崇			
	田辺勇太 ^{*3}		紙屋佳知(Los Alamos National Lab.)				桐井智弘			
			加藤康之(Los Alamos National Lab.)				押川公成			
			佐藤年裕(物性研)							
			田村亮(物材機構)							
			箭内俊介		内山敦夫					

括弧内は現在の所属。ただし、客員については着任時の所属。

*1: スパコン運用担当助教, *2: 2004 年度は首都大からの留学研究生, *3: 首都大からの留学研究生

図 5: 研究室構成人員の変遷。

- [1] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balentz, S. Sachdev, and M.P.A. Fisher: Science **303**, 1490 (2004).
- [2] K. Harada, N. Kawashima, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **90**, 117203 (2003).
- [3] N. Kawashima and Y. Tanabe: Phys. Rev. Lett. **98**, 057202 (2007).
- [4] A.B.Kuklov, M.Matsumoto, N.V.Prokof'ev, B.V.Svistunov, and M.Troyer: Phys. Rev. Lett. **101**, 050405 (2008).
- [5] J. Lou, A. Sandvik and N. Kawashima: Phys. Rev. B **80**, 180404(R) (2009).
- [6] J. Lou, T. Suzuki, K. Harada and N. Kawashima: arXiv:1212.1991.
- [7] H. Kageyama, et al: Phys. Rev. Lett. **84**, 5876 (2000).
- [8] For a review, see S. Miyahara and K. Ueda: J. Phys.: Condens. Matter **15**, R327 (2003).
- [9] S.Sachdev: private communication.

ISSP 国際ワークショップ

ナノスケール活性領域の3D原子イメージング

期間：2012年8月6日～2012年8月8日(3日間)

場所：東京大学柏図書館メディアホール

提案代表者：林 好一（東北大金研）
共同提案者：大門 寛（奈良先端大）
郷原 一寿（北大院工）
高橋 敏男（東大物性研）
吉信 淳（東大物性研）
佐々木裕次（東大新領域）
大山 研司（東北大金研）
松下 智裕（JASRI/Spring-8）

平成24年8月6～8日の3日間、東京大学柏キャンパス柏図書館メディアホールにおいて、ISSP国際ワークショップ“3D atomic imaging at nano-scale active sites in materials”を開催した。沿革というほどのものではないが、二年前に東北大学金属材料研究所の共同利用による助成を受け、ワークショップ「原子分解能ホログラフィーによる中距離局所構造のサイエンス」（代表：奈良先端大学 大門 寛）を開催した。その評価は高く、事後の共同利用のヒアリングの採点ではNo.1だった。そのようなこともあり、二回目と位置づけるワークショップを、ここ物性研において企画した。国際ワークショップとしたこともあるが、発表者や参加者が大幅に増加し、規模と質の面で大きく成長したと考えている。

「3D 原子イメージング」というキーワードを中心に据えた研究会は、意外にも国内外でこれまで行われてきておらず、本企画は世界初の新しい取り組みとも言える。三次元原子配列は物質構造情報として究極のものであるが、並進対称性を有しない、添加元素、表面・界面、ナノ構造体などの「活性サイト」の3D原子イメージングは、X線回折や電子線回折等の手法で求めることは困難である。このような活性サイトを照らし出せる手法として、「光電子ホログラフィー」、「蛍光X線ホログラフィー」、「表面・界面散乱原子イメージング」、「電子回折イメージング」に焦点を当て、それらの現状、将来性、応用研究について、多くの関連の研究者を集め議論した。本ワークショップは、手法の先駆者や先端材料の研究者として招いた6名の著名な海外研究者の招待講演、及び、16件の一般口頭発表、23件のポスター発表から構成される。

ワークショップ初日は、X線と中性子線ホログラフィーに関するセッションを設けた。ここでは、ハンガリー科学アカデミーのFaigel博士とCser博士から、それぞれ、蛍光X線ホログラフィー及び中性子線ホログラフィーの講演があり、続いて、林（東北大）、細川氏（熊本大）、大山氏（東北大）から、これら手法に関する日本でのアクティビティーについて紹介があった。Faigel博士とCser博士から、黎明期における原子分解能ホログラフィーに関する背景と、蛍光X線・中性子線ホログラフィーに関する発想について、興味深い話を伺うことができた。日本では応用研究について、その成果が実りつつあり、今後、大いに学術雑誌を賑わすことが予感できる。加えて、日本では新しい中性子線ホログラフィーのプロジェクトが立ち上がっており、将来、得られるであろう成果が楽しみである。なお、初日最後に上海交通大学のXin教授による、応用試料として有望な先端金属系材料の話題が紹介された。

二日目の午前中に光電子ホログラフィー、午後には表面・界面散乱原子イメージングのセッションを設けた。光電子ホログラフィーに関しては、大門氏（奈良先端大）に、歴史的背景について紹介してもらい、その後、松井氏（奈良先端大）、上坂氏（堀場製作所）、松下氏（JASRI）らから、最新成果の紹介があった。特に、左右の円偏光X線を用いた二枚の光電子回折パターンによる原子の立体視技術の確立や、それをさらに応用し、パワーデバイスとして用いられるSiON/SiCやグラフェンなどの層・サイトを選択的に構造解析できるという話題は興味を引いた。手法や解析法に関しても、'逆'光電子ホログラフィーの開発や元素識別できる原子像再生アルゴリズムの開発など、大きな進展があったと思われる。

表面・界面散乱原子イメージングに関しては、ウィスコンシン大の Saldin 博士の講演があり、その後、白澤氏(東大)、虻川氏(東北大)、若林氏(阪大)らの、主に応用研究に関する発表が続いた。トピックス的には、基板からの X 線散乱を参照波、その上に堆積している物質からの X 線散乱を物体波とみなした CTR 散乱ホログラフィーに注目が集まった。この、表面・界面原子イメージング技術は、構造精密化の計算技術も非常に発達しており、表面や界面の結合状態や電気二重層の構造など、電子密度の僅かな変化を捉えることも可能なまでに進化している。今後、表面・界面構造を解析する上で欠かせない手法になるであろう。また、森川氏(阪大)からは、界面状態の理論計算に関する話題もあり、観測による界面の三次元的な原子配列の決定が、理論計算の面においても極めて重要であることが指摘された。

二日目の夕方にはポスターセッションが開催された。多くは若手研究者や学生による発表であったが、優れた発表も多く、活気あるものとなった。各々のポスターは、外国人招待研究者や提案者らによって採点され、二名の若手研究者にポスター賞が与えられた。夜には、懇親会が賑やかに行われ、外国人研究者らとの交流や次回企画に関する話し合いが進んだ。二名のポスター受賞者の表彰式も、ここで行われた。

最終日は、回折イメージングと新規手法、応用研究についてのセッションを設けた。まず、光州科学技術院の Noh 博士と北京科技大の Chen 博士には、それぞれ X 線と電子線の回折イメージングについての講演を行ってもらい、続いて、西野氏(北海道大)、山崎氏(名古屋大)から日本での回折イメージングの最新成果についての紹介があった。他、佐々木氏(東大)から時分割白色 X 線回折を用いたタンパク分子のダイナミクス、吉信氏(東大)から有機薄膜の界面現象、大前氏(長岡技科大)からは室温強磁性半導体に関する話題があった。特に回折イメージングは、放射光分野においては、最もホットなトピックスの一つであることから、熱気のこもったセッションとなった。今後は、タンパク分子や有機分子などのダイナミクスを回折イメージングで観測できると良いと感じた。

本ワークショップでは、合計 70 名を超える参加者があり、非常に活気のある討論が行えた。また、最終日の最後のセッションまで参加者があまり減らずに、その活気を維持できたことも特筆すべき点と考えている。本ワークショップを通し、触媒やタンパク分子の活性部位のメカニズムを明らかにする上で、「3D 活性原子イメージング技術」が重要であるという共通認識が得られた。これまで、一堂に会することのなかった異分野研究者間の交流も進み、新しい枠組みや分野形成を考える上で重要なヒントを得られたと考えている。本シンポジウムに招待した研究者との交流は現在も続いており、次回ワークショップの開催地として、ヨーロッパサイトを検討している。

遠方からも多くの方に本ワークショップに参加してもらい、活発なご議論をして頂いたことに、この場にて厚くお礼を申し上げます。



集合写真 (8月7日、柏図書館にて)

プログラム

■口頭講演

2012年8月6日(月)

13:15 - 13:30 Mon_P1

Opening Remarks

13:30 - 14:15 Mon_P2

X-ray Holography: a Historical Overview

G. Faigel, G. Bortel, and M. Tegze

Wigner Research Centre for Physics, Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary

14:15 - 14:45 Mon_P3

Development of X-ray Fluorescence Holography toward a New Dimension of Local Structure Analysis

K. Hayashi

IMR/Tohoku Univ.

14:45 - 15:15 Mon_P4

X-ray Fluorescence Holography: Applications to Materials Sciences

S. Hosokawa

Kumamoto Univ.

15:15 - 15:30 BREAK

15:30 - 16:15 Mon_P5

Holographic Imaging of Atomic Scale Objects Using Thermal Neutrons

L. Cser

Wigner Research Centre Physics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary

16:15 - 16:45 Mon_P6

Neutron Holography Measurement as a Novel Probe of Local Structures of Spins and Light Atoms

K. Ohoyama, K. Hayashi, T. Oku^A, and T. Shinohara^A

IMR/Tohoku Univ., ^AJAEA

16:45 -17:15 Mon_P7

Strain Glass Behavior and its Microstructure Origin in Au-Cu-Al Alloys

X. Jin, J. Y. Liu, and M. J. Jin

School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, China

2012年8月7日(火)

9:30 – 10:15 Tue_A1

New Photoelectron Emission Microscope for 3D Atomic Imaging by Photoelectron Holography and Stereo-photograph

H. Matsuda, L. Toth^A, K. Goto, F. Matsui, T. Matsushita^B, M. Morita, H. Nojiri, and H Daimon
NAIST, ^AUniv. Debrecen, Hungary, ^BJASRI/SPring-8

10:15 – 10:45 Tue_A2

Photoelectron Diffraction Spectroscopy for Atomic Site Specific Property Analysis of Surface and Subsurface

F. Matsui^{A,B}, M. Muntwiler^C, T. Greber^B, R. Westernström^B, R. Stania^B, T. Matsushita^D, and H. Daimon^A
^ANAIST, ^BUniv. Zurich, ^CPaul Scherrer Institut / Swiss Light Source, ^DJASRI/SPring-8

10:45 – 11:00 Break

11:00 – 11:30 Tue_A3

Internal Detector Electron Holography: Lab-scale Atomic Resolution Holography with SEM

A. Uesaka^{A,D}, K. Hayashi^B, T. Matsushita^C, I. Kanno^D, S. Arai^A, and S. Komatani^A
^AHORIBA Ltd., ^BTohoku Univ, ^CJASRI, ^DKyoto Univ.

11:30 – 12:00 Tue_A4

Control System for Photoelectron Holography at SPring-8 and 3D Atom Image Reconstruction Algorithm

T. Matsushita, K. Hayashi^A, F. Matsui^B, and H. Daimon^B
JASRI/SPring-8, ^ATohoku Univ., ^CNAIST

12:00 – 12:30 Tue_A5

First-Principles Simulations of Chemical Reactions at Interfaces

Y. Morikawa
Osaka Univ.

12:30 – 13:30 Lunch

13:30 – 14:15 Tue_P1

Structure Determination by X-ray Scattering

D. K. Saldin
Dept. Physic, Univ. Wisconsin-Milwaukee, USA

14:15 – 14:45 Tue_P2

Reconstruction of Atoms at Surface/Interface by Using X-ray Crystal Truncation Rod Scattering

T. Shirasawa and T.Takahashi
ISSP/Univ. Tokyo

14:45 – 15:15 Tue_P3

Application of Surface X-ray Scattering Holography to Complex Materials

Y. Wakabayashi

Osaka Univ.

15:15 – 15:45 Tue_P4

New Structural Model for Si(111)5x2-Au: Determined Experimentally by Weissenberg RHEED

Tadashi Abukawa

IMR/Tohoku Univ.

15:45 – 16:00 Break

16:00 – 17:45 Poster Session

18:00 – 20:00 Banquet

2012年8月8日(水)

9:30 – 10:15 Wed_A1

Improving Spatial and Time Resolution of Coherent X-ray Diffraction Imaging

D. Y. Noh, C. Kim, Y. Kim, C. Song, K. S. Liang, and Y. Hwu

Dept. Photonics and Appl. Phy. & Sch. Mat. Sci. and Eng., Gwangju Inst. Sci. and Tech., Gwangju, Korea

10:15 – 10:45 Wed_A2

Coherent Imaging with XFEL

Y. Nishino, Y. Tanaka^A, Y. Bessho^A, Y. Joti^B, M. C. Newton, T. Kimura, C. Song^A, E. Matsubara^C, K. Tono^B, T. Sato^A, M. Yabashi^A, and T. Ishikawa^A

RIES, Hokkaido Univ., ^ARIKEN Spring-8 Center, ^BJASRI, ^CKyoto Univ.

10:45 – 11:00 Break

11:00 – 11:45 Wed_A3

2D/3D Time-resolved Single Molecular Observations with X-rays and Electrons

Y. C. Sasaki

Univ. Tokyo

11:45 – 12:15 Wed_A4

Geometric Isotope Effects Originating from Different Potential Energy Surfaces: Cyclohexane on Rh(111)

T. Koitaya, S. Shimizu, K. Mukai, S. Yoshimoto, and J. Yoshinobu

ISSP/Univ. of Tokyo

12:15 – 13:15 Lunch

13:15 – 14:00 Wed_P1

Atomic Resolution Tomography after Big Bang

D. V. Dyck and F.-R. Chen^A

Dept. of Physics, University of Antwerp, Belgium, ^ADept. of Engineering and System Science, National Tsing Hua University, Taiwan

14:00 – 14:30 Wed_P2

Reconstruction of Nano Electric Fields and Atomistic Structures by Electron Diffractive Imaging

J. Yamasaki, S. Morishita, K. Ota, T. Kato^A, H. Sasaki^B and N. Tanaka

Nagoya Univ., ^AJapan Fine Ceramics Center, ^BFurukawa Electric Co., LTD.

14:30 – 15:00 Wed_P3

Analysis of Local Structure around Mn in Ferromagnetic ZnSnAs₂:Mn Thin Films by X-ray Fluorescence Holography

H. Oomae, Y. Yamagami, A. Suzuki, H. Hayashi^A, N. Happo^B, Y. Takehara^B, S. Hosokawa^C, W. Hu^D, M. Suzuki^E, and N. Uchitomi

Nagaoka Univ. Tech., ^ATohoku Univ., ^BHiroshima City Univ., ^CKumamoto Univ., ^DJAEA, ^EJASRI

15:00 – 15:15 Wed_P4

Closing Remarks

■ポスター講演 2012年8月7日(火)

Tue_PS1

Local Atomic Structure Analysis of Ferromagnetic Semiconductor Ge_{0.6}Mn_{0.4}Te by Atomic Resolution Holography

N. Happo, Y. Takehara, M. Fujiwara, K. Tanaka, F. Matsui^A, H. Daimon^A, T. Matsushita^B, K. Okada^B, S. Senba^C, S. Hosokawa^D, K. Hayashi^E, and H. Asada^F

Hiroshima City Univ., ^ANAIST, ^BSpring-8/JASRI, ^CUbe Nat. Col. Tech., ^DKumamoto Univ., ^EIMR/ Tohoku Univ., ^FYamaguchi Univ.

Tue_PS2

Direct Observation of Rhombohedral Distortion in Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃ by X-ray Fluorescence Holography

W. Hu^A, K. Hayashi^B, N. Happo^C, K. Ohwada, J. Chen^D, Z-G. Ye^E, S. Hosokawa^F, and M. Takahashi^{A,F}

^AJAEA, ^BIMR/Tohoku Univ., ^CHiroshima City Univ., ^DUSTB, ^ESFU, ^FKumamoto Univ., ^FUniv. Hyogo

Tue_PS3

γ -ray Holography by Using Synchrotron Nuclear Resonant Scattering

K. Okada, T. Matsushita, Y. Yoda, T. Ohata, M. Kawase, N. Happo^A, S. Hosokawa^B, K. Hayashi^C, and Y. Sakurai

Spring-8/JASRI, ^AHiroshima City Univ., ^BKumamoto Univ., ^CTohoku Univ.

Tue_PS4

Structural Analysis of ZnSnAs₂ Thin Films by X-ray Fluorescence Holography

A. Suzuki, K. Yamagami, H. Oomae, K. Hayashi^A, N. Happo^B, S. Hosokawa^C, W. Hu^D, M. Suzuki^E, and N. Uchitomi

Nagaoka Univ. Tech., ^ATohoku Univ., ^BHiroshima City Univ., ^CKumamoto Univ., ^DJAEA, ^ESpring-8/JASRI

Tue_PS5

2D/3D X-ray Observation of Forced Rotational Brownian-particle with High-speed DXT in Aqueous Solution

K. Hoshisashi^{A,B}, H. Sekiguchi^{A,B}, K. Ichiyanagi^{A,B}, Y. Suzuki^{A,B}, Y. Matsushita^A, N. Yagi^{B,C}, T. Matsuo^C, N. Oota^C, and Y. C. Sasaki^{A,B,C}

^AUniv. Tokyo, ^BJST/CREST Sasaki-team, ^CSPring-8/JASRI

Tue_PS6

Development of Diffracted X-ray Tracking for Observation of Two Dimensional Rotational Motions Inside Individual Single Protein Molecules

K. Ichiyanagi, H. Sekiguchi, M. Hoshino^A, K. Kajiwara^A, T. Sato^B, S. Nozawa^B, S. Adachi^B, N. Yagi^A, and Y. C. Sasaki

Univ. Tokyo, ^AJASRI, ^BPF-KEK

Tue_PS7

Three-dimensional Dynamical Observations of Nanocolloid in Water Using Diffracted Electron Tracking

N. Ogawa, H. Sekiguchi^A, K. Hoshisashi^B, Y. Hirohata, A. Ishikawa, and Y. C. Sasaki^B

Nihon Univ., ^AJASRI, ^BUniv. Tokyo

Tue_PS8 -Best Poster Award-

Cooperativity Analysis of Multi-subunit proteins by 3D X-ray Single Molecule Tracking

H. Sekiguchi, Y. Yamamoto^A, M. Ariga^A, Y. Nishino^B, K. Ichiyanagi^C, N. Yagi, A. Miyazawa^B, M. Yohda^A, and Y. C. Sasaki^C

JASRI, ^ATokyo Univ. Agricult. Tech., ^BUniv. Hyogo, ^CUniv. Tokyo

Tue_PS9

Surface Structure Analysis of the Organic Semiconductor Tetracene Single Crystals

H. Morisaki, K. Miwa, J. Takeya, T. Kimura, and Y. Wakabayashi

Osaka Univ.

Tue_PS10

The Holographic Approach to Oversampled Surface X-ray Diffraction Data

Hiroo Tajiri

JASRI/SPring-8

Tue_PS11

Structure of Gold Atomic Chains on the Si(553) Surface and Their Low-temperature Structural Changes

W. Voegeli^A, T. Takayama^B, K. Kubo^B, M. Abe^B, T. Shirasawa^B, T. Takahashi^B, and H. Sugiyama^A

PF-KEK, ^AISSP Univ. Tokyo

Tue_PS12

In situ Phase Retrieval of X-ray Amplitude Reflectivity by Using Multiple X-ray Diffraction Phenomenon

W. Yashiro, Y. Yoda^A, K. Miki^B, and T. Takahashi^C

IMRAM Tohoku Univ., ^AJASRI, ^BONC NIMS, ^CISSP Univ. Tokyo

Tue_PS13

Molecular Arrangement of Pentacene Ultrathin Film Studied with Surface X-ray Scattering

T. Shirasawa, M. Ohyama, W. Voegeli^A, and T. Takahashi

ISSP Univ. Tokyo, ^APF-KEK

Tue_PS14

Atomic and Electronic Structures of Tl2212 studied by Auger Electron Diffraction and X-ray Absorption Spectroscopy

C. Sakai, F. Matsui^A, T. Matsushita^B, Y. Kato^C, T. Narikawa^A, K. Goto^A, T. Matsumoto^A, and H. Daimon^A

Univ. Tokyo, ^ANAIST, ^BJASRI, ^CAIIST

Tue_PS15

Polarization-Dependent Angle-Resolved Photoemission Study on Quasi-One-Dimensional BaVS₃

H. Sato, K. Tobimatsu, A. Tanaka, H. Nakamura^A, H. Hayashi, J. Jiang, H. Iwasawa, K. Shimada, M. Atita, M. Nakatake, H. Namatame, and M. Taniguchi

Hiroshima Univ., ^BKyoto Univ.

Tue_PS16

Influence of Elastic Scattering on the Measurement of Core-level Binding Energy Dispersion in X-ray Photoemission Spectroscopy

E. F. Schwier, C. Monney^A, N. Mariotti, Z. Vydrov^a, M. García-Fernández, C. Didiot, M. G. Garnier, and P. Aebi

University of Fribourg, Switzerland, ^BPaul Scherrer Institute, Switzerland

Tue_PS17

Circular Dichroism in Resonant Photoelectron Diffraction at Ni L₂-edge

M. Fujita, F. Matsui, Y. Fujioka^A, M. Takizawa^A, H. Namba^A, N. Maejima, H. Matsui, R. Horie, R. Ishii, K. Yasuda, T. Matsushita, and H. Daimon

NAIST, ^ARitsumeikan Univ., ^BJASRI/SPring-8^C

Tue_PS18 -Best Poster Award-

Layer-resolved Atomic and Electronic Structure Analysis of Graphene on 4H-SiC(0001) by Photoelectron Diffraction Spectroscopy

H. Matsui, F. Matsui, N. Maejima, T. Matsushita^A, and H. Daimon

NAIST, ^AJASRI/SPring-8

Tue_PS19

Atomic and Electronic Structure Analysis of Crystalline Oxide Film on ZrB₂ by Two-dimensional Photoelectron Diffraction and Spectroscopy

R. Horie, F. Matsui, M. Takizawa^A, N. Maejima, H. Matsui, T. Matsushita^B, S. Otani^C, T. Aizawa^C, H. Namba^A, and H. Daimon

NAIST, ^ARitsumeikan Univ., ^BJASRI/SPring-8, ^CNIMS

Tue_PS20

Atomic and Electronic Structure Analysis of Epitaxial Silicon Oxynitride Thin Film on 6H-SiC by Two-dimensional Photoelectron Diffraction Spectroscopy

N. Maejima, F. Matsui, K. Goto, H. Matsui, M. Hashimoto, T. Matsushita^A, S. Tanaka, and H. Daimon
NAIST, ^AJASRI/SPring-8

Tue_PS21

Photoelectron Diffraction Spectromicroscopy: Atomic Scale Characterization of Fe Poly-crystalline Surface

K. Yasuda, F. Matsui, T. Matsushita^A, N. Maejima, H. Matsui, S. Kitagawa, R. Horie, R. Ishii, M. Fujita, and H. Daimon
NAIST, ^AJASRI/SPring-8

Tue_PS22

Atomic Structure Analysis of Mechanically Exfoliated Graphene by Micro Photoelectron Diffraction

R. Ishii, F. Matsui, S. Koh, Y. Hosokawa, T. Matsushita^A, M. Morita, S. Kitagawa, M. Fujita, K. Yasuda, and H. Daimon
NAIST, ^AJASRI/SPring-8

Tue_PS23

Atomic and Magnetic Structure Analysis of Sr₂FeMoO₆ by PED and XMCD

S. Kitagawa, F. Matsui, T. Matsushita^A, N. Maejima, H. Matsui, K. Goto, and H. Daimon
NAIST, ^AJASRI/SPring-8

ISSP ワークショップ

強相関物質開発の最前線

日時：平成 24 年 10 月 22 日(月)午後 1 時～10 月 23 日(火)午後 1 時

場所：物性研究所 6 階セミナー室（本館 A615 室）

提案代表者：廣井 善二（物性研究所）

共同提案者：陰山 洋（京都大学）

野原 実（岡山大学）

上田 寛（物性研究所）

強相関電子系に関する研究は、現在の物性物理学において最も多くの研究者人口を有する重要な分野である。その舞台となる強相関物質開発に関する研究は、銅酸化物高温超伝導体の発見を大きな契機として、さらに対象とする物質の枠を広げ、新しい測定手段を取り入れることにより着実に進歩を遂げており、この分野は今後も益々発展するものと思われる。

物性研究所はこれまで強相関電子系の新物質開発において日本の中心拠点の一つとして大きな貢献をしてきた。その研究の流れをさらに推し進めるためには、新物質開発の現状を詳細に検討し、今後進むべき方向を見極めることが重要である。本ワークショップでは、現在、強相関電子系物質分野を主導している研究者と今後の活躍が期待されている若手研究者が一堂に会して集中的な議論を行う事により、新たな研究の展開を図ることを目的とする。さらに所内の物性実験や理論グループからの参加により活発な議論が期待される。

ワークショップには、講演者 14 名を含む計 60 名以上の参加者があり、非常に活発な質疑応答が行われた。様々な物質の合成と物性に関する発表がなされ、最近発見された新超伝導体についても興味深い報告がなされた。本ワークショップは強相関電子系分野における新物質研究の今後の展望を与えるよい機会となった。さらに、この分野において今後、物性研究所が果たすべき役割とそのプレゼンスを高めるための方策を考える上で重要な示唆を与えた。一方、物質関係の若手研究者が集まることを通して、コミュニティー作りに貢献したことも特筆すべき点である。今後もこのような機会を設けて物質研究を盛り上げ、物性研究の基盤を形成していくことが重要であろう。



プログラム

10月22日 座長 廣井 善二

- 13:00 廣井 善二 はじめに
13:05 石渡 晋太郎 東大物工 准教授
層状 4d, 5d 遷移金属化合物における異常輸送現象と超伝導の探索
13:40 植田 浩明 京大理 准教授
フッ素を含む三次元フラストレート磁性体の開発
14:15 大串 研也 物性研 特任准教授
反転対称性の破れた導電体の開拓
14:50 岡本 佳比古 物性研 助教
フラストレーション化合物
15:25 休憩

座長 陰山 洋

- 15:50 鬼丸 孝博 広島大 准教授
 $4f^2$ 配位を持つ Pr 金属間化合物における多極子自由度と多彩な基底状態
16:25 片山 尚幸 名古屋大工 助教
ペロブスカイト型チタン酸化物の d 軌道の電子状態
17:00 工藤 一貴 岡山大理 助教
 BaNi_2As_2 における巨大な格子のソフト化と超伝導転移温度の増大
17:35 齊藤 高志 京大化研 助教
A サイト秩序型ペロブスカイト構造を舞台とした物質・物性探索
19:00 懇親会

10月23日 座長 島川 祐一

- 9:00 櫻井 裕也 物材機構 主任研究員
 NaCr_2O_4 の巨大磁気抵抗効果
9:35 セドリック タッセル 京大工 特任助教
Negative Thermal expansion of $(\text{Sr,Ca})\text{FeO}_2$ with FeO_4 square planes
10:10 東中 隆二 首都大理工 助教
 $\text{LnT}_2\text{Al}_{20}$ ($\text{Ln} = \text{Pr, Sm}$) における強相関電子物性
10:45 休憩

座長 野原 実

- 11:10 矢島 健 京大工 博士研究員
正方格子 d^1 超伝導体 $\text{BaTi}_2\text{Pn}_2\text{O}$ ($\text{Pn} = \text{Sb, Bi}$)
11:45 山浦 淳一 物性研 助教
5d 遷移金属パイロクロアの合成と物性研究
12:20 和氣 剛 京大工 助教
機械的特性と磁性を併せ持つ貫入型複金属化合物の探索
12:55 おわりに

*講演時間 25 分、討論時間 10 分とする

アブストラクト

層状 4d, 5d 遷移金属化合物における異常輸送現象と超伝導の探索

石渡 晋太郎 (東大物工 准教授)

新しい熱電・超伝導材料の鉱脈を求めて層状構造を有する 4d, 5d 遷移金属化合物の物質開拓を行っている。これらは比較的電子相関が小さいために高い移動度をもつこと、また大きなスピン軌道相互作用により非自明なバンド構造を有することが期待される。本講演では、Ag, Mo, Irなどを主要元素として含む層状カルコゲナイドで見いだされた、新奇な磁気輸送特性、熱電特性、及び超伝導を紹介する。

フッ素を含む三次元フラストレート磁性体の開発

植田 浩明 (京大理 准教授)

パイロクロアやスピネルに代表される三次元構造をもつフラストレート磁性体は、主に酸化物を中心に研究が行われている。一方、フッ化物においても、パイロクロア、変型パイロクロアおよびダブルペロブスカイトなどの構造をもつフラストレート磁性体が多く知られている。これらの系においては、スピンのフラストレーションと共に、軌道や電荷のフラストレーションや格子の不安定性などが存在し、複数の自由度の競合により、新規な相転移が期待できる。上記の三つの構造をもつフッ化物について、講演者が近年行ってきた研究を中心に、フッ化物の合成手法および相転移に関して発表する。

反転対称性の破れた導電体の開拓

大串 研也 (物性研 特任准教授)

近年、強誘電体やマルチフェロイクスなど、反転対称性の破れた電子相の研究が活発になされているが、これらの電子相は電気的には絶縁体である。本講演では、結晶点群あるいは磁気点群において反転対称性が破れた金属を具体的に例示し、その電気・磁気・光学物性を論じる。

ブリージングパイロクロア格子反強磁性体 $\text{LiGaCr}_4\text{O}_8$ と $\text{LiInCr}_4\text{O}_8$

岡本 佳比古 (物性研 助教)

正三角形を基本ユニットとするような、幾何学的にフラストレートした格子をもつ物質には、物質屋・合成屋の手の届く範囲に未知の電子相や新しい物理現象があると考え一貫して幾何学的フラストレート系の新物質開拓を行ってきた。研究会では、その最近の成果である新しいフラストレート磁性体 $\text{LiGaCr}_4\text{O}_8$ と $\text{LiInCr}_4\text{O}_8$ を紹介する。両物質は、四面体サイトが Li^+ と $\text{Ga}^{3+}/\text{In}^{3+}$ の二種類のイオンで閃亜鉛型に秩序して占有された A サイト秩序型のスピネル酸化物である。この秩序の影響で、局在 $S = 3/2$ スピンを担う Cr^{3+} イオンは通常のスピネル酸化物にみられるようなパイロクロア格子ではなく、大小の正四面体が交互配置した"ブリージング"パイロクロア格子を組む。当日は、このブリージングが磁性に与える影響を中心として、両物質の構造と物性を議論する。

4f² 配位を持つ Pr 金属間化合物における多極子自由度と多彩な基底状態

鬼丸 孝博 (広島大 准教授)

4f 電子を 2 個持つ非クラマース Pr³⁺イオン(J = 4)の点群が立方晶系の場合には、結晶場基底状態が磁気モーメントを持たない非磁性二重項となる可能性がある。この二重項では 4f 電子の多極子自由度が活性となるので、サイト間の多極子に働く相互作用や、局在した多極子と伝導電子やフォノンとの相互作用によってその縮退は解かれ、多彩な基底状態を形成する。

立方晶 PrPb₃は T_Q = 0.4 K で電気四極子が交替的に空間整列する反強四極子(AFQ)秩序を示す[1]。電気四極子の秩序構造は、磁場中での中性子回折実験により、非整合の長周期サイン波磁気構造と同定された[2]。このようなサイン波構造は、4f 電子が完全に局在している場合には許されないで、伝導電子による四極子の遮蔽効果(四極子近藤効果)が働いているのかもしれない。あるいは、この系の長周期で変調する四極子秩序が遍歴 4f 電子状態における四極子密度波である可能性もある。

最近われわれは、非磁性二重項を結晶場基底状態を持つ新しい物質群の探索を目指し、新しいタイプのカゴ状物質群である立方晶 PrT₂Zn₂₀ (T = Rh, Ir)に着目し、研究を進めてきた[3,4]。ここで、Pr は 16 個の Zn に囲まれているため 4f 電子と伝導電子の混成チャンネルは多くなり、全体として混成効果が増強されることが予想される。T = Rh, Ir の系の結晶場基底状態は非磁性二重項であり、それぞれ T_Q = 0.06 K と 0.11 K で AFQ 秩序を示すことが明らかになった。さらに、T_Q 以下の T_c = 0.06 K と 0.05 K においてバルクの超伝導転移を確認された。AFQ 秩序相内で超伝導状態が実現している初めての例であり、電気四極子と超伝導の相関に興味を持たれる。実際、T_Q でのエントロピーは T = Rh と Ir でそれぞれ Rln2 の 10% と 20% 程度であることから、T_Q 以下でも四極子揺らぎが残っていることが示唆される。もしそうだとすれば、四極子揺らぎが超伝導対の形成に関与している可能性が高い。

- [1] P. Morin and D. Schmitt: *Ferromagnetic Materials*, ed. K. H. J. Buschow and E. P. Wohlfarth (Elsevier, Amsterdam, 1990) 5, 1.
- [2] T. Onimaru et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 197201 (1-4) (2005).
- [3] T. Onimaru et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 033704 (1-4) (2010).
- [4] T. Onimaru et al., *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 177001 (1-4) (2011).

ペロブスカイト型チタン酸化物の d 軌道の電子状態

片山 尚幸 (名古屋大工 助教)

遷移金属の d 軌道の電子状態は結晶場の影響を大きく受けている。従って、遷移金属酸化物の示す興味深い物性を理解するには、遷移金属サイトにおける結晶場の状態を議論することが重要となる。本研究では、放射光 X 線を用いて調べた正確な原子座標データをもとに、周囲の配位子がもたらすポテンシャルから着目する遷移金属の d 軌道の電子状態を明らかにする手法の開発を行っている。ターゲットとして磁性、軌道電子の状態が良く調べられているペロブスカイト型チタン酸化物 RTiO₃ (R = Y, Sm)を用い、チタンを取り囲む酸素の配位子場の計算を行った。RTiO₃ではチタンの d 電子の軌道秩序化に伴うヤンテラー歪が生じており、TiO₆ 八面体は正八面体から歪んでいる。R イオンの種類によって、磁気的な基底状態が異なることから、磁性と軌道の関係についても注目された系である。結晶場を正確に把握するため、正八面体からの歪を Q₂ - Q₆ の歪モードに分解し、得られたパラメータを用いて軌道分裂と波動関数の導出を試みた。詳細は当日報告するが、現時点では共鳴 X 線散乱[1, 2]や偏極中性子回折[3]では異なる基底状態を示す波動関数に差が見られていなかったのに対し、系統的なモード計算から結晶場が分類できることが分かってきた。一方、結晶場の議論とは全く独立に実験的な価電子密度分布を引き出すことが出来れば、上記の構造物性の解釈と直接比較が可能となる。我々の

グループでは SPring-8 で収集した高輝度で高い空間分解能の X 線回折データを用いて、マキシマムエントロピー法 (MEM) と多極子展開法を組み合わせ解析を行い、電子分布の直接観測の手法開発も行っている。当日はこの手法から求めた波動関数についても報告し、両者の比較を行う。

- [1] H. Nakao et al. : Phys. Rev. B. **66**, 184419 (2002).
- [2] H. Ichikawa et al. : Physica B. **281**, 482 (2000).
- [3] J. Akimitsu et al. : J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 3052 (2001).

BaNi₂As₂における巨大な格子のソフト化と超伝導転移温度の増強

工藤 一貴 (岡山大理 助教)

格子がソフト化すると、しばしば高い転移温度 T_c を持つ超伝導が出現する。例えば、CaC₆ や Te に圧力を印加すると、構造相転移に向けて格子がソフト化し、 T_c が増大する。本研究では、ThCr₂Si₂ 型 BaNi₂As₂ に P をドーブすると、正方晶から三斜晶への構造相転移が抑制され、その臨界点において格子が著しくソフト化し、 T_c が 0.6 K から 3.3 K へ不連続に上昇することを示す[1]。化学置換による格子のソフト化は、高 T_c を得る有用な手段と言える。

- [1] K. Kudo, M. Takasuga, Y. Okamoto, Z. Hiroi, and M. Nohara, Phys. Rev. Lett. 109, 097002 (2012).

A サイト秩序型ペロブスカイト構造を舞台とした物質・物性探索

齊藤 高志 (京大化研 助教)

A サイト秩序型ペロブスカイト AA'₃B₄O₁₂ は、単純ペロブスカイト ABO₃ における A サイトの一部にも遷移金属イオンを持つため、新規物性探索の舞台として魅力ある物質群である。我々はこれまで高压合成法を用いて多様な物性を示す A サイト秩序型ペロブスカイトを合成してきた。最近、平面四配位 A' サイトが Cu²⁺ や Mn³⁺ といった Jahn-Teller 活性種のみならず Mn²⁺ や Mn⁺ といった低価数 Mn イオンでも占められ、これらがスピングラスや興味深い磁性を示すことを見出したので報告する。

NaCr₂O₄ の巨大磁気抵抗効果

櫻井 裕也 (物材機構 主任研究員)

カルシウムフェライト型構造をもつ NaCr₂O₄ を発見した。同構造は CrO₆ 八面体の 2 重ルチル鎖 (NaCrO₂ などの三角格子から 2 列取り出したもの) をもちフラストレーションと 1 次元性が期待できる。本物質は 125K で傾角反強磁性を示す絶縁体であるが、磁気転移点以下で顕著な負の磁気抵抗効果を示すことが分かった。反強磁性状態で起こる新しいタイプの磁気抵抗効果である。講演では、新しいタイプと言える理由を示した後、磁気相図の特徴、Ca 置換系の奇妙な磁性などについて報告する。

Negative Thermal expansion of (Sr,Ca)FeO₂ with FeO₄ square plane

セドリック タッセル (京大工 特任助教)

SrFeO₂ exhibits a tetragonal "infinite layer" (IL) structure composed of FeO₄ square-planes [1]. The substitution of strontium by calcium, up to 80%, results in a linear decrease of the lattice. By further increasing the Ca/Sr ratio, a slight drop of the a-axis and an increase of the c-axis lengths are observed implying a different structure for the end member CaFeO₂ [2]. In this structure, the infinite layers contain FeO₄ units which distort from square-planes toward tetrahedra and rotate along the c-axis [3]. The study of the thermal evolution of the solid solution reveals a negative thermal expansion of the volume (NTE) induced by a large increase of the c-axis upon decreasing temperature. This behavior is remarkable given that both CaFeO₂ and SrFeO₂ exhibit conventional positive thermal expansion. Therefore, the observed NTE is intimately correlated with the nature of the solid solution. We will present our investigation of this behavior by the use of Rietveld refinement of neutron data, EXAFS of strontium and calcium and reverse Monte-Carlo studies.

- [1] Y. Tsujimoto et al, Nature **450**, 1062 (2007).
- [2] C. Tassel et al, J. Am. Chem. Soc. **130** (12), 3764 -3765 (2008).
- [3] C. Tassel et al, J. Am. Chem. Soc. **131** (1), 221–229 (2009).

LnT₂Al₂₀ (Ln = Pr, Sm) における強相関電子物性

東中 隆二 (首都大理工 助教)

最近、カゴ状物質 LnT₂Al₂₀ において重い電子状態、量子臨界現象等の様々な強相関電子物性が見出されている。その中で、LnT₂Al₂₀ の Pr 系において非磁性二重項基底状態に起因した四極子近藤効果の実現が議論されており、また、Sm 系においては磁場に鈍感な相転移及び重い電子状態が観測されており複数の f 電子を持つ強相関電子系として注目を集めている。これらの系における我々の研究結果について発表させていただく。

正方格子 d¹ 超伝導体 BaTi₂Pn₂O (Pn = Sb, Bi)

矢島 健 (京大工 博士研究員)

Na₂Ti₂As₂O をはじめとするチタンニクタイト酸化物は、Na 層と [Ti₂As₂O] 層が交互に積層した Anti-K₂NiF₄ 型構造をとる。この系は、銅酸化物超伝導体と同様に、Anti-CuO₂ 平面である Ti₂O 平面を含む。また電子状態という観点からは、銅酸化物超伝導体の Cu²⁺(d⁹) という電子状態に対し、Na₂Ti₂As₂O においては Ti³⁺(d¹) という電子状態をとることから、電子・ホールを逆にした対照的な系である。我々は、Na 層の代わりに Ba 層を含む新規化合物、BaTi₂Pn₂O (Pn = Sb, Bi) の合成に成功した。いずれも金属的な挙動に加え T_c = 1.2 K (Pn = Sb), T_c = 4.6 K (Pn = Bi) において超伝導転移を示したことから、銅酸化物との関係に興味を持たれる。本発表では、BaTi₂Pn₂O の合成および詳細な物性について議論する。

5d 遷移金属パイロクロアの合成と物性研究

山浦 淳一 (物性研 助教)

5d 遷移金属パイロクロアは、ラットリングと超伝導、結晶対称性と特徴的磁気構造、トンネル構造とプロトン伝導といった、構造と深く関連した興味深い物性を示す。講演では、同物質系における純良結晶育成法、 $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ の金属絶縁体転移と磁気構造の研究、ベータ型パイロクロア酸化物における超伝導、超プロトン伝導、といった話題について触れる。

機械的特性と磁性を併せ持つ貫入型複金属化合物の探索

和氣 剛 (京大工 助教)

従来、貫入型炭化物、窒化物は機能的な材料として注目されてきた。例えば WC は超硬合金に用いられ切削工具として用いられ、また Fe_{16}N_2 は Fe を超える飽和磁化を有し、希土類フリーの永久磁石材料として期待されている。貫入型複金属化合物は、それら機械的特性と磁性を併せ持つ可能性がある。我々は、機械的特性が注目されてきたイーターカーバイド型化合物及び MAX 相化合物において、磁気関連現象の探索を行なっている。当日はこれまでに得られた成果について報告する。

第 57 回物性若手夏の学校開催報告

第 57 回物性若手夏の学校準備局代表 河底 秀幸

1. 物性若手夏の学校の特徴

物性若手夏の学校は物性物理学の研究に従事する全国の若手研究者が一堂に会する場として、1956 年の開校以来長きに渡り開催され続けてきた。修士課程の学生が参加者の半数以上を占めており、物性物理学の基礎から最先端の研究までを概括できるよう講義・セミナーが催されている。また参加者自身が主体的に発表を行い、発表経験の乏しい学生にとっての学会発表へ向けた実践的な練習の機会としても大いに役立つ。本夏の学校では経験豊富な博士課程の学生も参加し、発表での白熱した議論が修士課程の学生に刺激を与えている。博士課程の学生自身にとっても異分野の後輩との交流は自身の研究の再認識・教育面のスキルの向上に役立っている。

物性若手夏の学校以外にも多くの研究会・サマースクールが開講されているが、他の研究会とは異なる物性若手夏の学校の最大の特徴として参加者の所属分野の多様さが挙げられる。本夏の学校の参加者の研究対象は物性分野におけるほぼ全ての領域をカバーし、さらに化学分野や工学分野など多岐にわたる。そのため、様々な視点を持った若手研究者間で熱い議論を交わし、相互に刺激を与え合う「異分野間交流」の場として他の研究会とは一線を画する。「異分野間交流」は、様々な分野への興味喚起・専門外の聴衆への配慮・いかなるテーマにおいても活発に議論する姿勢といった研究者としての素養を培うためには必要不可欠である。しかし実際には、同じ建物内の他研究室の学生との交流はなく、その研究内容についての興味が乏しい学生は少なくない。分野横断型の本夏の学校は若手研究者、特に研究を始めたばかりの修士課程の学生にとって、異分野の友人を作るよいきっかけになりえると考えられる。

2. 概要

今年度の物性若手夏の学校は、2012 年 8 月 6 日(月)～8 月 10 日(金)の 5 日間、岐阜県岐阜市のホテルパークで開催された。参加者は 192 名(男性：175 名、女性：17 名)であり、参加者の研究分野の分布は図 1 のようになった。プログラム(表 1)は、参加者が今後研究を進めていく上で不可欠なスキルを磨くべく、「学習」「発表」「交流」の 3 つを柱に構成されている。講義・集中ゼミが「学習」、ポスターセッション・分科会が「発表」、グループセミナー・懇談会が「交流」にそれぞれ対応している。

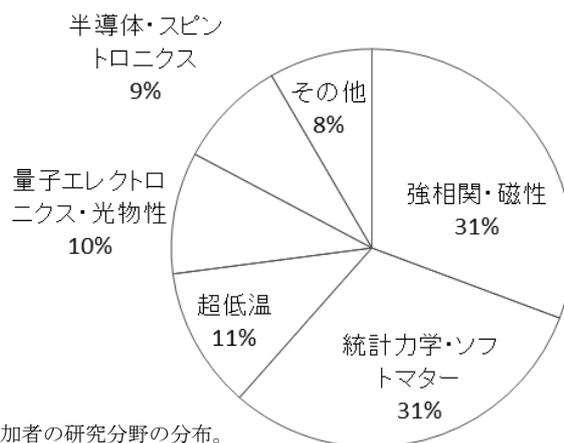


図 1. 参加者の研究分野の分布。

	8月6日(月)	8月7日(火)	8月8日(水)	8月9日(木)	8月10日(金)
午前		講義	講義	講義	チェックアウト
午後	チェックイン 講義プレビュー	グループセミナー	ポスターセッション 分科会	ポスターセッション 集中ゼミ	
夜	開校式	懇談会	懇談会	閉校式	

表 1. プログラム詳細。

まず、学習企画である座学形式の講義・集中ゼミを紹介する。講義は8月7日～8月9日の午前3時間を使い、各分野の基礎的な内容をじっくりと学び、集中ゼミは8月9日の午後3時間を使い、最新の研究の話題を中心に発展的な内容を学んだ。講師の先生は、スタッフ内で候補を出し、依頼をする形で決定した。今回の講義・集中ゼミでは、表2・表3に示す12名の先生をお呼びした。

講師	所属	講義タイトル
上田 和夫	東京大学物性研究所	強相関電子系における量子臨界現象と超伝導
蔡 兆申	理化学研究所・日本電気	ジョセフソン接合での巨視的量子コヒーレンスとその波及効果
西森 秀稔	東京工業大学大学院理工学研究科	量子アニーリングの数理
波多野 恭弘	東京大学地震研究所	非平衡統計力学 : 熱的系から非熱的系へ
村上 修一	東京工業大学大学院理工学研究科	スピン流の物理とトポロジカル絶縁体
柳瀬 陽一	新潟大学理学部物理学科	エキゾチック超伝導ミニマム

表2. 講義の招待講演者一覧、敬称略。

講師	所属	講義タイトル
有光 敏彦	筑波大学数理物質科学研究科	量子解放系を記述する正準演算子形式の理論体系とその応用 — Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics への誘い —
石田 憲二	京都大学理学研究科	強相関電子系物質の核磁気共鳴
勝本 信吾	東京大学物性研究所	半導体太陽電池
島 伸一郎	兵庫県立大学シミュレーション学研究科	超水滴法による雲形成・降水の精密シミュレーションとその応用
島野 亮	東京大学大学院理学系研究科	テラヘルツ電磁波を用いた物性研究 : 半導体から強相関電子系まで
松本 正和	岡山大学大学院自然科学研究科	水の計算物理学とデータマイニング

表3. 集中ゼミの招待講演者一覧、敬称略。



写真1. 講義・集中ゼミの様子(左:上田和夫先生、右:勝本信吾先生)。

続いて、発表企画であるポスターセッション・分科会を紹介する。ポスターセッションは8月8日・8月9日午後の2時間、分科会は8月8日午後の4時間を用いて行った。ポスターセッションは、文字通りポスター発表の企画であり、例年多くの参加者が発表を行う。分科会は、分野別に部屋を分けて行う口頭発表の企画である。参加者の発表に先立ち、各分野の最先端で活躍されている若手研究者による30分の招待講演を交えて、一人当たり発表10分・質疑応答5分という形式で行った。今回は表4に示す6名の先生をお呼びした。講演件数は、ポスターセッションが84件、分科会が37件と多くの発表が活発に行われた。

講師	所属	講義タイトル
大槻 道夫	青山学院大学理工学部	摩擦の素過程 ～弾性体はいつ滑るのか?～
内田 健一	東北大学金属材料研究所	スピンゼーバック効果
島田 尚	東京大学大学院工学系研究科	How to swim in sand
竹内 一将	東京大学大学院理学系研究科	界面成長とランダム行列の不思議な関係 ～目で見ると非平衡普遍法則～
永井 佑紀	日本原子力研究開発機構	超伝導準古典理論における準粒子励起
丸山 勲	大阪大学大学院基礎工学研究科	量子多体系の数値計算における 繰り込みと量子絡み合い

表 4. 分科会の招待講演者一覧、敬称略。



写真 2. 分科会・ポスターセッションの様子

最後に、交流企画であるグループセミナーと懇談会を紹介する。グループセミナーは物性若手夏の学校独自の企画であり、8月9日午後の4時間半を用いて、5～8人くらいのグループで自分の研究の概要と成果について発表・議論を合わせた。各グループは研究分野の異なる人で構成され、学年も偏ることがないようにした。参加者には異分野の人にも分かりやすい発表を心掛けてもらった。様々な研究分野を知ることで、参加者に異分野間交流の重要性に気付いてもらうことを意図した。例年のグループセミナーは広い部屋を区切って行っていたが、議論が白熱し、他のグループの議論の妨げになるという声もあったため、今回は各々の宿泊部屋で開催した。スタッフが各部屋を巡回して様子を確認しに行ったが、どの部屋でも概ね例年通りの白熱した議論が展開されていた。懇談会では、8月6日～8月9日の夜2時間半、研究の話はもちろん、研究室の様子や将来のキャリアビジョンなども含めて、様々なことを語り合った。参加者同士で刺激し合い、今後の研究へのモチベーションの向上につなげることが、ここでの一番の目的である。なお、懇談会には各企画でお呼びした講師の先生にも御参加頂いた。



写真 3. グループセミナーの様子。

3. 新しい取り組み

懇談会中の参加者の交流を促進する目的で「自己紹介カード」というものを導入した。これは、名前・所属・研究分野などを記載した名刺のようなものである。懇談会中に参加者同士で交換することで、初対面の人との会話をより楽しんでもらうことを期待した。実際、物性夏の学校最終日に行ったアンケートで「名刺交換があったおかげで色々な人と喋る機会が増えて、話しかけやすくなりました」などのコメントもあり、導入した効果はあった。

第 57 回物性若手夏の学校準備局には、遠方から参加者を増やすべく、交通費援助を拡充しようという声があった。そこで、物性若手夏の学校準備局の収入源の内の「協賛金」というものに着目した。これは、物性若手夏の学校の趣旨に賛同して頂いた企業や個人からの広告宣伝費や寄付金である。これまで「協賛金」のほとんどが企業からの出資で、個人からの寄付金はわずかであった。そのため、この個人からの寄付金で参加者への交通費援助を充実させるべく、物性若手夏の学校準備局 OB・OG へ寄付金の募集を行った。

4. 決算報告

下表に第 57 回物性若手夏の学校の決算を示す。

収入の部		支出の部	
機関からの援助	2,186,329	講師招聘費	573,989
東京大学物性研究所	500,000	世話人援助費	996,760
東北大学金属材料研究所	200,000	参加者援助費	410,100
京都大学基礎物理学研究所	486,329	テキスト印刷費・郵送費	450,030
材料科学技術振興財団	1,000,000	ポスター印刷費・郵送費	101,892
企業広告料	1,339,000	概要集等印刷費・郵送費	294,647
参加費	771,000	企画運営費	1,026,389
テキスト収入他	94,025	準備局経費	718,591
預金利息	828		
小計	4,391,182	小計	4,572,398
第 57 回のための準備金	772,376	第 58 回のための準備金	591,160
合計	5,163,558	合計	5,163,558

貴研究所からのご援助(50万円)は「テキスト印刷代・郵送代、及び貴研究所よりお借りしたポスターボードの運搬費の一部」という支出に対して使用させて頂きました。どちらも本物性若手夏の学校の主要企画である講義、集中ゼミ、ポスターセッションに欠かせない支出で、貴研究所の夏の学校へのご支援を心より感謝致します。また、ポスターボードを貸して頂いたことにも、重ねてお礼申し上げます。今後とも物性若手夏の学校へのご支援を賜りますよう、心よりお願い申し上げます。

5. 集え、若き物性科学者

冒頭でも述べたように、物性若手夏の学校の特徴は「異分野間交流」である。異分野の研究に携わる参加者と交流し、普段の研究生活では気付けない斬新な発想や、研究自体に対する新たな価値観を知ること、参加者の研究に対するモチベーションを向上させることが最大の狙いである。特に「異分野間交流」という観点からは、物性物理の世界の全体像をまだ掴めきれていない修士課程の学生の方や、研究を進める中で視野を広く持つことが重要だと感じている博士課程の学生の方にとって、貴重な経験ができる場であろう。

これまで物性若手夏の学校について本稿で概観してきたが、より詳しく知りたい点がある場合は、物性若手夏の学校準備局(メールアドレス: info@cmpss.jp)、もしくは身近にいる過去の物性若手夏の学校の参加者に聞いてほしい。第 58 回も多くの参加者が集い、物性若手夏の学校が賑わうことを切に願う。

*なお、日本物理学会誌「談話室」欄にも、今回の第 57 回物性若手夏の学校についての抄録および紹介記事が掲載される予定である。

物性研究所談話会

標題：平成 24 年度 後期客員所員講演会

日時：2012 年 10 月 18 日(木) 午前 10 時 30 分～午後 0 時

場所：物性研究所本館 6 階 大講義室(A632)

要旨：

平成 24 年度後期客員所員の講演会を開催しますので、奮ってご参加ください。

新任の客員の先生方におきましては、所内はもちろん所外を含め広くかつ活発な共同研究を展開されることを期待し、自己紹介及び物性研究所での研究目標等をご説明いただきます。

10:30-10:40 所長挨拶 (家 泰弘：物性研究所所長)

10:40-11:20 辺土 正人 (琉球大学)
「多重極限下の熱電特性」

11:20-12:00 Arno SCHINDLMAYR (University of Paderborn (Germany))
「Ab initio calculation of electronic excitations in solids」

物性研究所セミナー

標題：国際超強磁場科学研究施設セミナー：High Magnetic Fields for Science

日時：2012年9月4日(火) 午前10時～午前11時30分

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：Dr. S. Zherlitsyn

所属：Hochfeld-Magnetlabor Dresden, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Germany

要旨：

Magnetic fields are powerful tools for studying the state of matter. Under extreme conditions, such as high-magnetic fields, new interesting properties of matter can appear and an understanding of materials behavior can be gained. Access to high magnetic fields could provide new insight into various fundamental physical phenomena.

Currently the only ways to reach magnetic fields beyond 50 T are pulsed magnets. The Dresden High Magnetic Field Laboratory (Hochfeld-Magnetlabor Dresden, HLD) has achieved the strongest non-destructive magnetic fields in Europe. Last year the HLD held the world record for some time. Typical pulse durations of the available magnets are from 0.01 to 1 s that is long enough for many experiments which are usually performed in static magnetic fields. Magnetic fields up to about 90 T are available for user experiments such as electrical transport, magnetization, ultrasound, magnetostriction, electron spin resonance, and high-field infrared spectroscopy. Several less typical pulsed-field experiments, for instance, nuclear magnetic resonance or specific heat are also emerging at the HLD now. In my talk I explain how the pulsed fields are generated and applied for various scientific experiments. I will show you recent results obtained on some magnetic systems in high magnetic fields. Results of high-field ultrasound investigations will be analyzed in more details.

I acknowledge support from the “JSPS Invitation Fellowship Program for Research in Japan (Short-term)”.

標題：シリーズセミナー：極限コヒーレント光科学 14回目 「パルス X 線を用いた物質構造ダイナミクスの可視化」

日時：2012年9月5日(水) 午前10時30分～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師：足立 伸一

所属：高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

要旨：

X 線自由電子レーザーやエネルギー回収型リニアックなど、線形加速器をベースとした次世代 X 線光源の技術的進歩は目覚ましく、フェムト秒パルス X 線を利用した物質構造の超高速ダイナミクス研究が急速に進展しつつあります。

セミナーでは、講演者らがこれまで放射光蓄積リングを用いた時間分解 X 線測定で培ってきた測定技術と研究成果を紹介しつつ、それを踏まえて今後の次世代 X 線光源における研究展開について議論します。

標題：Au-Al-Yb 準結晶における量子臨界現象

日時：2012 年 9 月 24 日(月) 午後 4 時～午後 6 時

場所：共通セミナー室 (基盤棟 2 階)

講師：出口 和彦 助教

所属：名古屋大学

要旨：

Quasicrystals are metallic alloys that possess long-range, aperiodic structures with diffraction symmetries forbidden to conventional crystals. Since the discovery of quasicrystals by Schechtman et al. at 1984 (ref. 1), there has been considerable progress in resolving their geometric structure. For example, it is well known that the golden ratio of mathematics and art occurs over and over again in their crystal structure. Due to this quasi-periodicity, an unusual electronic state that is neither extended nor localized is expected; neither they are extended as in periodic crystals nor localized as in amorphous materials. However, such an unusual state has not yet been observed. The quasicrystal that we study here is a gold-aluminum-ytterbium alloy described as Au₅₁Al₃₄Yb₁₅ (ref. 2). In the present study, we report the first observation of quantum ($T = 0$) critical phenomena of the Au-Al-Yb quasicrystal – the magnetic susceptibility and the electronic specific heat coefficient arising from strongly correlated 4f electrons of the Yb atoms diverge as $T \rightarrow 0$. Furthermore, we observe that this quantum critical phenomenon is robust against hydrostatic pressure. By contrast, there is no such divergence in a crystalline approximant Au₅₁Al₃₅Yb₁₄, a phase whose composition is close to that of the quasicrystal and whose unit cell has atomic decorations (i.e., icosahedral clusters of atoms) that look like the quasicrystal. We propose a peculiar quantum critical behaviour of the Au-Al-Yb quasicrystal to reflect this unusual state expected for quasicrystals. It becomes apparent in the present system because of strong correlations induced by the 4f electrons of Yb. These results clearly indicate that the quantum criticality is associated with the unique electronic state of quasicrystal, i.e., a spatially confined critical state. Finally we discuss the possibility that there is a general law underlying the conventional crystals and the quasicrystals.

[1] D. Shechtman et al., Phys. Rev. Lett. 53, 1951 (1984).

[2] T. Ishimasa et al., Phil. Mag. 91, 4218 (2011)..

標題：理論セミナー：1次元電子系のスペクトル関数における特異性の考察：朝永-ラッティンジャー液体描像をこえて

日時：2012 年 9 月 28 日(金) 午後 4 時～午後 5 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 3 セミナー室 (A613)

講師：前橋 英明

所属：東京大学物性研究所

要旨：

1次元電子系のフェルミ点近傍の物理は、電荷とスピンの自由度に対応した 2 種類のボゾン励起モードからなる朝永-ラッティンジャー液体描像によって良く記述される。朝永-ラッティンジャー液体では、絶対零度でも運動量分布関数の不連続性は存在せず、フェルミ点近傍における運動量分布関数の特異性を決める指数 ν は、1次元電子系を特徴づける重要なパラメーターになる。これに対応して、1粒子スペクトル関数にはランダウの準粒子ピークは存在せず、そのかわりに電荷とスピンの励起に対応した非対称なベキ発散特異性をもつ。

最近の研究の動向の 1 つは、この朝永-ラッティンジャー液体描像をこえて、フェルミ点近傍だけでなくフェルミ点から離れたところでも存在する 1 粒子スペクトル関数の特異的な性質を導出することである。フェルミ点から離れると、一般に(朝永-ラッティンジャー液体描像では無視されている)エネルギー分散の非線形性が重要になるが、この非線形性を考慮することによってスペクトル関数におけるベキ発散の指数が運動量の関数として求められることになる。

このような動向を踏まえてより包括的な理解を得るために、1次元電子系の有効模型である非線形分散をもつ物理的なフェルミオンの前方散乱模型を取り上げた。本講演では、この模型の 1 粒子スペクトル関数の解析結果を示す。この関数は、(電荷とスピンの励起エネルギーのところでのベキ発散特異性に加えて)物理的なフェルミ粒子のエネルギーのとこ

ろでなめらかにはつながらず、上向きのくさび形のカuspをもつ。そして、このカusp近傍の特異性を決める指数は一般に運動量の関数であるが、そのフェルミ点における極限值は運動量分布関数の指数・の値と一致する。また、フェルミ点から離れるにつれて、スペクトルのウェイトはベキ発散近傍からカusp近傍へと移っていく。このような 1 次元スペクトル関数におけるカuspの存在に対応して、擬 1 次元系の角度分解光電子分光スペクトルには、電荷-スピン分離に対応する 2 つのピークの間には 3 つめのピークが存在することが予測される。

標題：物性理論研究部門 秋季物理学会発表報告会

日時：2012 年 10 月 5 日(金) 午後 2 時～午後 6 時

場所：柏図書館 1F コンファレンスルーム

要旨：

- 14:00～14:15 高田 えみか (押川研究室 M1)
「ニッケル正三角クラスタの磁性」
- 14:15～14:30 西原 英臣 (押川研究室 M2)
「モンテカルロ法による PrRu₄P₁₂ の金属-絶縁体転移の研究」
- 14:30～14:45 藤 陽平 (押川研究室 D1)
「異方的三角スピントチューブにおける量子相転移：強結合展開による研究」
- 14:45～15:00 藤 陽平 (押川研究室 D1)
「S=1/2 4-leg spin ladder におけるスピギャップ相」
- 15:00～15:15 Nie Wenxing (押川研究室 D2)
「Intrinsic angular momentum of chiral px + ipy superfluid in two dimensional potentials」
- 15:15～15:30 熊野 裕太 (押川研究室 D1)
「離散的な内部対称性を持つ系における捻りに対する応答」
- 15:30～15:45 安田 真也 (藤堂研究室 M2)
「異方性の動的制御による量子相転移の数値的解析」

15 分休憩

- 16:00～16:15 Wu Hao (野口研究室 D2)
「Polymer-induced entropic effects on mechanical properties and phase separation of biomembranes」
- 16:15～16:30 渡辺 宙志 (川島研究室 助教)
「Ising 異方性を持つ古典 Heisenberg 模型における Binder パラメータ」
- 16:30～16:45 大久保 毅 (川島研究室 PD)
「磁場中三角格子反強磁性体における多重 Q 秩序・スカーミオン格子状態への磁気異方性の影響」
- 16:45～17:00 五十嵐 亮 (藤堂研究室 PD)
「ALPS プロジェクト厳密対角化の高速化・並列化」
- 17:00～17:15 多田 靖啓 (押川研究室 助教)
「超格子における重い電子系の研究」
- 17:15～17:30 阪野 壘 (加藤研究室 助教)
「アンダーソン量子ドットの高バイアス極限でのクーロン斥力による電流揺らぎ」
- 17:30～17:45 柳 有起 (上田研究室 PD)
「チェッカーボードハバード模型における奇周波数超伝導」
- 17:45～18:00 服部 一匡 (常次研究室 助教)
「格子振動と結合した 2 チャネルアンダーソン不純物模型における SO(5)非フェルミ液体」

標題：新物質セミナー：光学 SHG 観測による有機伝導体 α -ET 塩における純電子型の強誘電転移

日時：2012 年 10 月 11 日(木) 午後 2 時～午後 3 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：山本 薫

所属：分子科学研究所 物質分子科学研究領域・電子物性研究部門

要旨：

金属・超伝導性を発現することで知られる 2:1 塩を中心とした有機伝導体において電荷秩序転移をしめす系が多数見つかっている。我々は、これらの塩における伝導電荷の空間分布を明らかにする目的で、分子の価数状態に依存する分子振動を赤外・ラマンスペクトル観測によって解析してきた。その結果、電荷秩序する塩はみな赤外スペクトルに奇妙なディップ形の信号を示すことを発見した。モデル計算により、この信号は、電子-分子振動(e-mv)結合によって活性化した分子振動の倍音であることを示した、この議論を基として、我々は関連物質が強い非線形光学特性を示す可能性を予想し、実際に α -(ET)₂I₃ において電荷秩序に伴う強い SHG 信号の活性化を確認した。これはこの塩の電荷秩序が強誘電性転移であることを示している。講演では、SHG 干渉法による強誘電ドメインの映像化や、類似の α 塩において観測された強誘電性逐次転移について議論する。

標題：理論セミナー：Topological Entanglement Entropy and Minimum Entropy States

日時：2012 年 10 月 12 日(金) 午後 4 時～午後 5 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：Prof. Masaki OSHIKAWA

所属：ISSP, the University of Tokyo

要旨：

Topological phases are distinct quantum phases separated from a trivial phase by a quantum phase transition, but without any spontaneous symmetry breaking or local order parameter. A typical example is the Resonating-Valence-Bond (RVB) spin liquid phase proposed by P. W. Anderson as a possible description of disordered quantum antiferromagnets. While it was not straightforward to identify such a phase in concrete models, the existence of the RVB spin liquid phase (also known as Z_2 topological phase) has been confirmed in several special models. It is of much interest to identify the phase in more realistic models or in actual material. However, absence of “standard” orders does not provide positive evidence for the topological phase. Positive numerical evidences may be provided by topological degeneracy and topological entanglement entropy. However, these two are not independent, and topological entanglement entropy actually depends on the groundstate when there is a topological degeneracy. I review our work [1] which elucidates this relation, and very recent related developments [2] by other authors which show that the groundstate of Heisenberg antiferromagnet on kagome lattice belongs to the Z_2 topological phase.

[1] Y. Zhang, T. Grover, A. Turner, M. Oshikawa, and A. Vishwanath, Phys. Rev. B **85**, 235151 (2012)

[2] S. Yan, D. Huse, S. White, Science **332**, 1173 (2011); H.-C. Jiang, Z. Wang, and L. Balents, arXiv:1205.4289; S. Depenbrock, I. P. McCulloch, and U. Schollwöck, arXiv:1205.4858.

物性研究所 計算物質科学研究センター 第2回シンポジウム

～実験・計測・計算連携の新展開～

日時：2012年10月22日から2012年10月23日

場所：東大物性研6階 大講義室

【開催要項】

日時：2012年10月22日（月） 13:30 - 17:30

23日（火） 9:30 - 17:30

会場：東京大学物性研究所 6階大講義室

【概要】

SPring-8、J-PARC、SACLA等の大型計測施設がもたらす最新の研究成果と、「京」等のHPCIを利用する計算物質科学のテーマを取り上げ、元素戦略プロジェクトに代表される国家的・社会的な課題の解決を加速するための実験・計測・計算が連携して取り組むべき新しい基礎理論等を議論いたします。

【プログラム】

[10月22日（月）]

- 13:30-13:40 挨拶（家泰弘 東大・物性研究所）
- 13:40-13:50 挨拶（林孝浩 文部科学省 情報課）
- 13:50-14:00 計算物質科学研究センターの活動（常行真司 東大院・理/物性研究所）
- 14:00-14:30 超高速コヒーレント制御実験における大規模計算への期待（三沢和彦 東京農工大 工学研究院）
- 14:30-15:00 軟X線分光による水の価電子状態観測と局所構造の議論（原田慈久 東大・物性研究所）
- 15:00-15:30 界面活性剤の構造形成の粗視化シミュレーション（野口博司 東大物性研究所）
- 15:30-16:00 コーヒーブレイク
- 16:00-16:30 逆モンテカルロ法とDFT/MD計算を組み合わせた高速相変化材料の相変化メカニズムの解明（小原真司 JASRI/SPring-8）
- 16:30-17:00 先端スペクトロスコープと連携した強相関電子系の励起ダイナミクス研究（遠山貴己 京都大）
- 17:00-17:30 Ta₂O₅の構造と酸素空孔（杉野修 東大・物性研究所）
- 18:00 懇親会（カフェテリアにて開催予定）

[10月23日（火）]

- 09:30-10:00 分子内電子ダイナミクスの直接観測について（高塚和夫 東大）
- 10:00-10:30 液体の超高速光電子分光（鈴木俊法 京都大）
- 10:30-11:00 量子磁性状態の非磁性制御（宮下精二 東大）
- 11:00-11:30 コーヒーブレイク
- 11:30-12:00 第一原理計算による磁石材料の物性解明（三宅隆 産総研・ナノシステム）
- 12:00-12:30 パルス中性子を用いた新しい中性子イメージング法の開発（篠原武尚 原研・J-PARCセンター）
- 12:30-13:30 昼食
- 13:30-14:00 強誘電体中の双極子相互作用の高速計算（西松毅 東北大）
- 14:00-14:30 GPU スパコンにおけるフェーズフィールド法による樹枝状凝固成長の大規模シミュレーション（青木尊之 東工大）
- 14:30-15:00 アモルファス固体の力学物性-レプリカ法+液体密度汎関数法による第一原理的計算（吉野元 大阪大）
- 15:00-15:30 J-PARC, MLF 中性子実験装置におけるデータと求められる計算環境（稲村泰弘 原研・J-PARC センター中性子利用）
- 15:30-16:00 コーヒーブレイク
- 16:00-16:30 ランダム系物質の動的構造因子の理解に向けて（川北至信 原研利用セク）
- 16:30-17:00 ナノ粒子充填ゴムの辞空間構造解析とシミュレーション応用（岸本浩通 住友ゴム）
- 17:00-17:30 コヒーレントX線回折イメージングによる非結晶粒子の構造解析（中迫雅由 慶応大）
- 17:30 closing

標題：理論インフォーマルセミナー：Electron and Hole Hong Ou Mandel interferometry

日時：2012年11月1日(木) 午後2時30分～午後3時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Thibaut Jonckheere

所属：Centre de Physique Théorique, Marseille

要旨：

We consider the electronic analog of the quantum optics Hong-Ou-Mandel interferometer in a realistic condensed matter device based on single electron emission in chiral edge states. For electron-electron collisions we show that the measurement of the zero-frequency current correlations at the output of a quantum point contact produces a dip giving precious information on the electronic wave packets and coherence. As a feature truly unique to Fermi statistics and condensed matter, we show that two-particle interferences between electron and hole in the Fermi sea can produce a positive peak in the current correlations, which we study for realistic experimental parameters.

標題：理論セミナー：スピンアイス伝導系の輸送理論：抵抗極小現象と非従来型異常ホール効果

日時：2012年11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：宇田川 将文

所属：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

要旨：

Apparently, the concept of "geometrical frustration" seems irrelevant to itinerant electron systems, in which electron wave packets extend over the entire system, being insensitive to local lattice structure, i.e., whether the lattice is frustrated. A curious exception can be found in a hybrid system where itinerant electrons interact with localized moments on a frustrated lattice. Geometrical frustration often gives rise to non-trivial spatial correlation in localized moments. Through the interaction with peculiar spatial structure, itinerant electrons sometimes acquire anomalous characters.

In this talk, we consider itinerant electron systems coupled to spin ice, a representative object brought about by geometrical frustration. This setting is relevant to several metallic Ir pyrochlore oxides, such as $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ($\text{Ln}=\text{Pr}, \text{Nd}$), where Ir 5d conduction electrons interact with Ln 4f localized moments. In these compounds, several anomalous transport phenomena have been reported. The electrical resistivity shows a clear minimum [1, 2], which cannot be explained by the canonical scenario of Kondo effect. The Hall conductivity exhibits non-monotonic and highly anisotropic magnetic field dependence [3], suggesting that the conventional theory of Hall effect does not work for this system. To address these issues, we adopt a spin-ice-type Ising Kondo lattice model on a pyrochlore lattice. We solve this model by applying the cluster dynamical mean-field theory and the perturbation expansion in terms of the spin-electron coupling, and obtain longitudinal and transverse conductivities by the Kubo formula.

As a result, we found that (i) the resistivity shows a minimum at a characteristic temperature below which spin ice correlation sets in [4]. (ii) The Hall conductivity shows anisotropic and non-monotonic magnetic field dependence due to the scattering from the spatially extended spin scalar chirality [5]. These results well account for various aspects of the experimental data of $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ($\text{Ln}=\text{Pr}, \text{Nd}$), and give new insights into the role of geometrical frustration in itinerant electron systems.

This work has been done in collaboration with H. Ishizuka, Y. Motome and R. Moessner.

[1] S. Nakatsuji et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 087204 (2006).

[2] M. Sakata et al., Phys. Rev. B **83**, 041102(R) (2011).

[3] Y. Machida et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 057203 (2007).

[4] M. Udagawa, H. Ishizuka and Y. Motome, Phys. Rev. Lett. **108**, 066406 (2012).

[5] M. Udagawa and R. Moessner, submitted.

標題：理論セミナー：Anomalous heat transport in low-dimensions and anomalous diffusion

日時：2012年11月9日(金) 午後4時～午後5時 (日本語講演)

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：齊藤 圭司

所属：慶應義塾大学理工学部物理学科

要旨：

Based on results obtained from a large number of numerical simulations and various analytical approaches it is now believed that Fourier's law is not valid in one and two dimensional mechanical systems and heat conduction is anomalous. Anomalous behavior in heat conduction is not only a theoretical issue but recently of experimental relevance in several low-dimensional materials such as carbon nanotube.

The Levy-walk model is known to provide a good description of anomalous heat conduction in one-dimensional systems. In this model the heat carriers execute Levy-walks instead of normal diffusion as expected in systems where Fourier's law holds.

Here we calculate exactly the average heat current, the large deviation function of its fluctuations and the temperature profile of the Levy-walk model maintained in a steady state by contact with two heat baths. We find that the current is nonlocally connected to the temperature gradient. As observed in recent simulations of mechanical models, all the cumulants of the current fluctuations have the same system-size dependence in the open geometry.

標題：第2回物質・物性セミナー：Geometrically Frustrated Magnets: Attempts to Subvert the Third Law

日時：2012年11月16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：Professor John E. Greedan

所属：McMaster University

要旨：

For typical magnetic materials, as the temperature decreases long range magnetic order occurs at a finite temperature, consistent with the Third Law which requires that the entropy (in this case spin disorder entropy) should approach zero as T approaches zero. In contrast for geometrically frustrated magnets in which the spins are arrayed on triangular or tetrahedral lattices, the long range ordered state is often unstable with respect to more exotic ground states such as spin glasses, spin ices and spin liquids. Following a brief introduction and review of geometric frustration, recent experimental results based on a series of materials known as ordered double perovskites (in which the magnetic lattice is face-centred cubic) will be reviewed with attention to the observation of unusual ground states. The roles of spin and orbital degrees of freedom will be emphasized. There will be an attempt to connect these results with the limited theory on this class of materials.

標題：理論セミナー：Electronic excitations in itinerant ferromagnets from first principles

日時：2012年11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：Prof. Arno Schindlmayr

所属：(ISSP and University of Paderborn, Germany)

要旨：

The long-range order of the electron spins in magnetic solids gives rise to particular excitation modes that preserve the charge density but change the total spin of the electron system. While Stoner excitations, which correspond to spin-flip transitions between the majority and minority channels, can be described within a single-particle picture, spin waves are low-energy collective modes that result from the spin-dependent exchange interaction between the electrons. Like other quasiparticles, they carry energy and momentum, participate in scattering events and can be probed by experimental spectroscopies.

In this talk I discuss different approaches that we have explored to take these modes into account in first-principles calculations of excitation spectra in magnetic materials. In the first part I focus on the dynamic transverse spin susceptibility, for which we employ time-dependent density-functional theory or many-body perturbation theory to treat dynamic exchange and correlation effects. In the latter case, maximally localized Wannier orbitals are used to efficiently obtain the electron-hole vertex of the multiple-scattering T matrix, which is constructed with the full frequency and wave-vector dependence. For the ferromagnetic transition metals Fe, Co and Ni our results are in good agreement with experimental data.

In the second part I turn to the quasiparticle band structure. While the widely used GW approximation for the electronic self-energy describes the dynamic screening of the electron charge or, in other words, the coupling of electrons to charge fluctuations, it ignores the analogous coupling to spin fluctuations in the surrounding electron system. Consequently, the deviations from experimental photoemission data are larger for this class of materials than for typical semiconductors. To improve the description of quasiparticle properties in magnetic solids we extend the GW approximation by including additional self-energy terms that account for spin-dependent scattering events. Although the preliminary implementation contains a number of additional simplifications, the results already show a clear improvement over earlier GW treatments.

標題：理論インフォーマルセミナー：Abe homotopy group and topological influence in multiple topological excitation systems

日時：2012年11月19日(月) 午前11時～午後0時

場所：柏図書館セミナー室2

講師：小林 伸吾

所属：東京大学大学院理学系研究科

要旨：

Topological excitations exist in various subfields of physics, such as condensed matter physics, elementary particle physics, and cosmology. They have been observed experimentally in gaseous Bose–Einstein condensates. We can classify them using the homotopy group. However, there is a case that the homotopy group is not consistent with a charge of a topological excitation when it coexists with a vortex, which effect is called the topological influence. In this case, physically consistent charges are given by the Abe homotopy group [1,2]. In this talk, I will present our study on how to classify topological excitations under the topological influence using Abe homotopy group and on the relation between the topological influence and the charge conservation.

[1] M. Abe, Jpn. J. Math. **16**, 179 (1940).

[2] S. Kobayashi, et al., Nucl. Phys. B **856**, 577 (2012)

標題：新物質セミナー：Studies of the unconventional superconductor CeCoIn5

日時：2012年11月30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：Dr. Filip RONNING

所属：Los Alamos National Laboratory, NM, USA

要旨：

The Ce and Pu-based 115's embody the notion that reduced dimensionality and increased spin fluctuation energy scales are good for unconventional superconductivity. These materials are strongly believed to have a gap structure with dx^2-y^2 symmetry. Impurities are known to be a microscopic probe of strongly correlated materials. We report a globally reversible effect of electronic tuning on the magnetic phase diagram in CeCoIn5 driven by electron (Pt and Sn) and hole (Cd, Hg) doping. We find that these nominally non-magnetic dopants have a remarkably weak pair breaking effect for a d-wave superconductor relative to the expectations based on Abrikosov-Gorkov theory. The pair breaking is weaker for hole dopants which induce magnetic moment than for electron dopants. Furthermore, both Pt and Sn doping have a similar effect on superconductivity despite being on different dopant sites, arguing against the notion that superconductivity lives predominantly in the CeIn₃ planes of these materials. Finally, we shed qualitatively understanding on our results with density functional theory calculations.

標題：理論セミナー：一次元量子気体：位相スリップと対向流超流動

日時：2012年11月30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：段下 一平

所属：京都大学基礎物理学研究所

要旨：

In recent years, experiments with ultracold atoms have extensively studied quantum degenerate gases of bosons or fermions confined in one-dimensional (1D) geometry by optical lattices [1]. It is well-known that due to strong quantum fluctuations, 1D quantum systems exhibit various interesting properties that are qualitatively different from those in higher dimensions.

In the first part of this talk, I will focus on superflow decay of 1D Bose gases induced by quantum nucleation of phase slips [2]. Recent experiments have shown that transport in 1D is drastically suppressed even in the superfluid state compared to that in higher dimensions. By simulating the transport dynamics with use of the quasi-exact time-evolving block decimation (TEBD) method, I will explain that the suppression of transport is due to the quantum phase slips and suggest a certain universal formula regarding the suppression of transport.

In the second part, motivated by the recent realization of mixed Mott insulators with Bose-Fermi mixtures of Ytterbium isotopes [3], I will discuss the counterflow superfluid of polaron pairs in one-dimensional Bose-Fermi mixtures confined in optical lattices. I will present the ground-state phase diagrams of the Bose-Fermi-Hubbard model calculated by the TEBD method in order to show that the PP-CFSF phase occupies a large region of the parameter space [4].

References

- [1] M. A. Cazalilla et al., Rev. Mod. Phys. **83**, 1405 (2011).
- [2] I. Danshita and A. Polkovnikov, Phys. Rev. A **85**, 023638 (2012).
- [3] S. Sugawa et al., Nat. Phys. **7**, 642 (2011).
- [4] I. Danshita and L. Mathey, arXiv:1204.3988v1 (2012).

標題：理論インフォーマルセミナー：Holographic Models of the (Fractional) Quantum Hall Effect

日時：2012年12月3日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Rene Meyer

所属：Kavli IPMU

要旨：

After a general introduction into AdS/CFT and why it might be applied to condensed matter systems, I will review progress made so far in finding holographic duals of Quantum Hall states with fractional or integer filling fractions. At the end, I will present results of work in progress to implement the approximate $SL(2, Z)$ action on the fractional quantum Hall filling fractions in a holographic model.

標題：理論インフォーマルセミナー：Nonthermal symmetry-broken states and nonequilibrium criticality in the Hubbard model

日時：2012年12月11日(火) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Philipp Werner

所属：University of Fribourg

要旨：

Quenches from the antiferromagnetic to the paramagnetic phase of the Hubbard model are studied within nonequilibrium dynamical mean field theory. In the strong correlation regime, the system can get trapped in a nonthermal, symmetry-broken state. We argue that this is due to the long life-time of artificially created doublons and the "entropy cooling" effect of the spin sector. In the weak-coupling regime, a different type of trapping phenomenon can be observed, which is related to the integrability of the model in the lowest-order (Hartree) approximation. Our results may be relevant for the interpretation of symmetry breaking and symmetry restoration transitions in correlated materials.

標題：中性子セミナー：最近の物理化学研究から

日時：2012年12月12日(水) 午後2時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：Dr. Marie-Claire Bellissent-Funel, Prof. Volker Kempter, Prof. Osamu Yamamuro

要旨：

水の中性子散乱の研究で著名な Bellissent-Funel 博士と表面の電子分光の研究で著名な Kempter 教授が来日された機会に、中性子セミナーを企画しました。講演内容は、蛋白質と水和水、イオン液体、プロトン伝導体といずれも現在の物理化学のトピックスになっているものばかりです。お時間のある方は、奮ってご参加下さい。

14:00-15:00 Dr. Marie-Claire Bellissent-Funel (LLB and CNRS)

Protein Dynamics and Hydration Water

15:00-16:00 Prof. Volker Kempter (Clausthal University of Technology)

The Surface Composition and Electronic Structure of Ionic Liquid Surfaces

16:00-17:00 Prof. Osamu Yamamuro (ISSP, University of Tokyo)

Water and Protons in Porous Coordination Polymers

受賞

堀川裕加氏（辛埴研究室特任研究員）が国際会議 EMLG/JMLG 2012 で Poster Prize を受賞

2012年9月5日～9日の期間、ハンガリーの Eszterházy Károly 大学で国際会議 EMLG/JMLG (European/Japanese Molecular Liquids Group) Annual Meeting 2012 が開催されました。溶液中の分子構造、ダイナミクス、分子間相互作用を実験、理論、シミュレーションを用いて研究する研究者同士の交流を目的としたこの会議では、溶液化学の分野で活躍する若手研究者を奨励するために、Poster Prize を設けています。

本会議で堀川氏は“Electronic state of liquid molecules observed by soft X-ray emission spectroscopy”という題目で、SPring-8 BL17SUにおいて開発された発光分光器と軟X線の偏光特性をうまく用いることで明らかにされた液体分子の電子状態について発表しました。本手法は溶液中の特定の分子と溶媒の相互作用の強度や方向を解析することができ、今後の溶液化学の研究において重要な役割を担うと期待されます。本研究成果を通じて堀川氏は高く評価され、このたび2012年の EMLG/JMLG Annual Meeting の Poster Prize を受賞することとなりました。

高木宏之氏（軌道放射物性研究施設助教）が第8回日本加速器学会奨励賞を受賞

高木宏之助教（軌道放射物性研究施設）が第8回日本加速器学会奨励賞を受賞しました。高木氏は加速器の入射システムを研究しており、世界に先駆けてパルス6極電磁石を使った蓄積型放射光源の電子入射方式の開発研究を行い、トップアップ運転時の蓄積ビームの振動を容易に抑制する入射方法を実用化しました。現在、この入射システムは高エネルギー加速器研究機構の Photon Factory においてユーザー運転に使われており、世界中の多くの放射光源が注目しているシステムです。今回この研究が高く評価され受賞となりました。

山口啓太氏（末元研究室博士課程2年）が IRMMW-THz 2012 Student Award (First Place) 受賞

極限コヒーレント光科学研究センター(旧先端分光研究部門)末元研究室(理学系研究科物理学専攻博士課程2年)の山口啓太氏が2012年9月23日から28日の間オーストラリア、ウロンゴン大学で開催された国際会議 IRMMW-THz 2012にて Student Award (First Place)を受賞しました。この賞はミリ波、テラヘルツ領域などの長波長電磁波に関連した研究のなかで優れた発表を行った大学院生に授与されるものです。山口氏は本会議で“Observation of Spontaneous Spin Reorientation in ErFeO_3 with Terahertz Time Domain Spectroscopy”という題目で発表を行いました。

同氏はテラヘルツ波の磁場成分をサブピコ秒の磁場パルスとして利用し、磁性体の磁化に直接働きかけ歳差運動を誘起する、超高速スピン励起・制御に関する研究を行ってきました。本発表ではオルソフェライト ErFeO_3 において生じるスピン再配列転移の観測をテラヘルツ時間領域分光法を用いて行い、この相転移を数ピコ秒の分解能で判別できることを示しました。この研究発表が高く評価され今回の受賞となりました。この研究成果は可視超短パルス光を照射することで発生する超高速スピン再配列転移の相転移ダイナミクスの解明などにつながり、スピントロニクスなどの応用面での実用性も期待されます。

なお、同氏は2011年秋季応用物理学会においても「テラヘルツ波ダブルパルスによる弱強磁性体における超高速スピン制御」という発表を行い、第31回応用物理学会講演奨励賞を受賞しています。

東京大学物性研究所一般講演会

標題：東京大学物性研究所一般講演会

日時：2012年11月23日(金) 午後2:00～午後5:00

場所：東京大学 柏図書館メディアホール

要旨：■プログラム

日時：平成24年11月23日(金・祝) 14:00～17:00 (13:30 開場)

場所：東京大学柏図書館メディアホール

(柏市柏の葉 5-1-5 東京大学柏キャンパス内)

先着160名／入場無料

講演Ⅰ 「アルスー科学の源流ー」

伊達宗行先生 公益財団法人新世代研究所理事長、大阪大学名誉教授

講演Ⅱ 「科学の見方、科学的見方」

家 泰弘教授 東京大学物性研究所所長

主催：東京大学物性研究所

共催：柏市

人事異動

【研究部門等】

○ 平成 24 年 11 月 30 日付け

(辞 職)

氏 名	所 属	職 名	備 考
山 浦 淳 一	附属物質設計評価施設	助 教 教	東京工業大学元素戦略プロジェクト特任准教授へ

○ 平成 24 年 11 月 1 日付け

(採 用)

氏 名	所 属	職 名	備 考
宮 脇 淳	附属極限コヒーレント光科学研究センター 軌道放射物性研究施設	助 教 教	理化学研究所研究員より
渡 邊 浩	附属極限コヒーレント光科学研究センター	特任助教	京都大学物質-細胞統合システム拠点ポスドクより

○ 平成 24 年 11 月 16 日付け

(採 用)

氏 名	所 属	職 名	備 考
笠 松 秀 輔	附属物質設計評価施設	助 教 教	東京大学大学院工学系研究科博士課程より

○ 平成 24 年 12 月 31 日付け

(任期满了)

氏 名	所 属	職 名	備 考
前 橋 英 明	物性理論研究部門	助 教 教	物性研究所特任研究員へ

東京大学物性研究所教員公募について

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

記

1. 研究部門名等および公募人員数

物質設計評価施設 助教 1名

2. 職務内容

物質設計評価施設 X線測定室の管理・運営に従事するとともに、物性研究所内外の研究者と共同研究を積極的に行い、構造物性の視点に基づく物質開発・物性研究を強力に推し進める意欲のある若手研究者を求めます。また、X線回折実験に関する全国共同利用の便宜を図る任務を負う。結晶構造解析に関する経験を有することが望ましいが、未経験者の場合には着任後これを習得することが求められる。

3. 応募資格

修士課程修了、またはこれと同等以上の能力を持つ方。

4. 任期

5年。ただし、審査の上、1回を限度として再任を認める。

5. 公募締切

平成25年3月1日（金）必着

6. 着任時期

決定後なるべく早い時期

7. 提出書類

- 推薦書または意見書
- 履歴書（略歴可）
- 業績リスト（特に重要な論文に○印を付すこと）
- 主要論文の別刷（3編、コピー可）
- 研究業績の概要（A4用紙2ページ以内）
- 研究計画書（A4用紙2ページ以内）
- 自己アピール（A4用紙1ページ以内）

8. 書類提出先

「物質設計評価施設助教応募書類在中」の旨を朱書し、下記住所まで書留にて郵送または持参すること。

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5丁目1番5号

東京大学物性研究所総務係

電話: 04-7136-3207 e-mail: issp-somu@kj.u-tokyo.ac.jp

9. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所物質設計評価施設 教授 廣井 善二

電話: 04-7136-3445 e-mail: hiroii@issp.u-tokyo.ac.jp

10. 選考方法

東京大学物性研究所教授会にて審査、決定する。ただし、適任者のない場合には決定を保留する場合がある。

11. その他

応募書類等は返却しないので、了解の上、申込むこと。また、応募書類は本応募の用途に限り使用し、個人情報を正当な理由なく第三者へ開示、譲渡及び貸与することはない。

平成24年11月15日

東京大学物性研究所長

家 泰 弘

東京大学物性研究所教員公募について

下記により准教授の公募をいたします。適任者の推薦、希望者の応募をお願いいたします。

記

1. 研究部門名等および公募人員数

極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設

准教授 1名

2. 職務内容

本学が第3世代放射光施設 SPring-8 に整備したビームライン BL07LSU において、現スタッフと協力して新しい研究分野の開拓と共同利用実験の支援を行うとともに、高輝度軟 X 線放射光を利用した物質科学を精力的に進める。

3. 任期

満 56 歳に達する年度の初めに任期制に入り、任期は 5 年とし再任は 1 回を限度とする。なお、任期制の詳細については下記問い合わせ先までお尋ねください。

4. 公募締切

平成 25 年 7 月 31 日 (水) 必着

5. 就任時期

決定後なるべく早い時期を希望する。

6. 提出書類

(イ) 推薦の場合：

- 推薦書 (健康に関する所見を含む)
- 履歴書 (略歴で可)
- 業績リスト (必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつける)
- 主要論文の別刷 (5 編以内、コピー可)
- 研究業績の概要 (2000 字程度)
- 研究計画書 (2000 字程度)

(ロ) 応募の場合

- 履歴書 (略歴で可)
- 業績リスト (必ずタイプし、特に重要な論文に○印をつける)
- 主要論文の別刷 (5 編以内、コピー可)
- 研究業績の概要 (2000 字程度)
- 研究計画書 (2000 字程度)
- 所属長・指導教員等による応募者本人に関する意見書 (健康に関する所見を含み、作成者から書類提出先へ直送)

7. 書類提出先

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5 丁目 1 番 5 号

東京大学物性研究所総務係

電話: 04-7136-3207 e-mail: issp-somu@kj.u-tokyo.ac.jp

8. 本件に関する問い合わせ先

東京大学物性研究所極限コヒーレント光科学研究センター 辛 埴

電話: 04-7136-3380 e-mail: shin@issp.u-tokyo.ac.jp

9. 注意事項

「軌道放射物性研究施設准教授応募書類在中」、又は「意見書在中」の旨を朱書し、郵送の場合は書留とすること。

10. 選考方法

東京大学物性研究所教授会で審査決定いたします。ただし、適任者のない場合は、決定を保留いたします。

11. その他

お送りいただいた応募書類等は返却いたしませんので、ご了解の上お申込み下さい。また、履歴書は本応募の用途に限り使用し、個人情報とは正当な理由なく第三者への開示、譲渡及び貸与することは一切ありません。

平成24年12月18日

東京大学物性研究所長

家 泰 弘

物性研だより第 52 巻目録 (第 1 号～第 4 号)

第 52 巻第 1 号 2012 年 4 月

物性研に着任して	原田 慈久	1
	上田 顕	2
再び物性研を離れるにあたって	柿崎 明人	3
外国人客員所員を経験して	CAO, Guanghan	5
	TANG, Shu-Jung	6
研究室だより		
○中辻研究室		7
物性研究所談話会		14
物性研究所セミナー		15
物性研ニュース		
○人事異動		23
○東京大学物性研究所教員公募について		25
○平成 24 年度前期短期研究員一覧		30
○平成 24 年度前期外来研究員一覧		31
○平成 24 年度前期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧		42
○平成 24 年度中性子回折装置共同利用採択課題一覧		47
○平成 24 年度後期共同利用の公募について		58
○平成 23 年度外部資金の受入について		59
その他		
○ISSP-CMSI international Workshop MASP2012		60
○第 57 回物性若手夏の学校		61
○「物性研だより」掲載記事の WEB 公開許諾のお願い		62
編集後記		
物性研だよりの購読継続について		

第 52 巻第 2 号 2012 年 7 月

極限コヒーレント光科学研究センターの設立	小森 文夫	1
物性研に着任して	阪野 壘	3
	中村 壮智	4
研究室だより		
○金道研究室		5
○常次研究室		10
ISSP 柏賞を受賞して	野澤 清和	16
	鷺山 玲子	18
	浅見 俊夫	20
	杉浦 良介	21
第 9 回 ISSP 学術奨励賞受賞後所感	宮田 敦彦	22
	Kittiwit Matan	25

物性研究所短期研究会

○物性研究所共同利用スパコン成果報告会「計算科学の課題と展望」 29

ISSP ワークショップ

○トポロジカル絶縁体の表面電子状態 35

○三軸分光器研究会 45

客員で行った研究の紹介 柄木 良友 47

客員所員を経験して 江口 豊明 49

工藤 昭彦 51

滞在記 客員准教授(2011年10月-2012年3月)として 奥田 哲治 53

物性研究所談話会 54

物性研究所セミナー 55

物性研ニュース

○小森文夫教授、第16回日本表面科学会学会賞を受賞 64

○人事異動 65

○東京大学物性研究所教員公募について 66

編集後記

第52巻第3号 2012年10月

極限コヒーレント光科学研究センターの設立 II 辛 埴 1

中性子科学研究施設の現状と展望 柴山 充弘 5

物性研での37年間を振り返って 八木 健彦 17

物性研を離れて 久保田 実 21

研究室だより

○押川研究室 25

○松田巖研究室 35

物性研滞在型国際ワークショップ

○「MASP2012」報告 42

ISSP 国際ワークショップ

○「コヒーレント軟X線科学」 47

ISSP ワークショップ

○表面・界面における輸送と変換 51

○定常中性子源三軸分光器の役割と偏極中性子散乱 58

客員教授を経験して 梶原 孝志 65

平成23年度客員所員を経験して 江 偉華 67

物性研究所セミナー 68

物性研ニュース

○浜根大輔技術職員(電子顕微鏡室)、第9回日本鉱物科学会研究奨励賞を受賞 72

○平成24年度後期短期研究員一覧 73

○平成24年度後期外来研究員一覧 74

○平成24年度後期スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧 87

○平成25年度前期共同利用の公募について 90

編集後記

第 52 卷第 4 号 2013 年 1 月

国際超強磁場科学研究施設 — 過去、現在、そして近未来……………	嶽山 正二郎、金道 浩一……………	1
物性研に着任して……………	宮脇 淳……………	8
	渡邊 浩……………	9
	笠松 秀輔……………	10
物性研を離れるにあたって……………	佐藤 卓……………	11
客員での研究の紹介……………	高橋 一志……………	13
平成 24 年度客員所員を経験して……………	山口 明……………	15
一客員所員の夢……………	小林 達生……………	17
研究室だより		
○川島研究室……………	川島 直輝……………	18
ISSP 国際ワークショップ		
○ナノスケール活性領域の 3D 原子イメージング……………		24
ISSP ワークショップ		
○強相関物質開発の最前線……………		33
第 57 回物性若手夏の学校開催報告……………	河底 秀幸……………	40
物性研究所談話会……………		45
物性研究所セミナー……………		46
物性研ニュース		
○受賞……………		56
○東京大学物性研究所一般講演会……………		57
○人事異動……………		58
○東京大学物性研究所教員公募について……………		59
物性研だより第 52 巻目録（第 1 号～第 4 号）……………		61
編集後記		

編 集 後 記

2012年の年の瀬に編集後記を書いております。この12月に衆議院選挙が終わり、政権の交代がありました。民主党から自民党に変わり、今後の政策の変化を国民全体が期待と不安を抱きながら注意深く見守っているところです。ところで、少しずつですが、物性研においても転機があり、読者におかれましては今後どのように変わっていくのかと興味深いところだと思います。今年度の物性研だよりは、その御期待に応えるべく一連の企画として、大型施設・センターの現状と将来計画を紹介して参りました。今回は、世界一を誇る物性研の看板施設のひとつとして、国際超強磁場科学研究施設の紹介を嶽山所員と金道所員にいただきました。ぜひ、ご一読ください。また、2012年において物性研には様々な先生、研究者の転出・転入がありました。今月号は、東北大学に異動された佐藤先生に加え、新たに物性研に着任された3人の助教の方々に異動のご挨拶を寄せていただきました。また、川島所員には「研究室だより」を、3名の客員所員の先生方には研究の近況やその夢について執筆いただきました。お陰様で、このように盛りだくさんなお届けできるようになりました。お忙しい中、執筆いただいた方々に改めて感謝申し上げます。2013年もいろいろな意見の発信の場として、ますます生き活きとした「物性研だより」を創っていければと思っております。よろしくお願いいたします。

中 辻 知