物性研だより

第55巻
第3号
2015年10月

目次

1 リチウムイオン電池が充放電する際の電極の詳細な電子状態を観測
— 軟X線発光分光法により充放電に伴う電子の振る舞いが明らかに —
・・・・・・・・・・・・・・・・・朝倉 大輔、細野 英司、原田 慈久
5 単一原子層表面超伝導体のステップにおけるジョセフソン渦糸の実空間観察
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・長谷川 幸雄
7 電子軌道の量子揺らぎによる新しい超伝導の発見
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・松本 洋介、中辻 知
10 「京」を用いた大規模分子動力学法による気泡間相互作用の解明
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・渡辺 宙志
13 電荷の不安定性による新規な量子相転移の発見
・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・松林 和幸、上床 美也
16 物性研に着任して・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・黒田 健太
17 物性研を離れて・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・上田 和夫
19 外国人客員所員を経験して・・・・・・・・・・・・Henrik M. Ronnow
20 客員所員を経験して・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・佐藤 卓
22 物性研滞在型国際ワークショップ・シンポジウム
物性研究所短期研究会
24 ○『機能物性融合科学研究会シリーズ(3)「反応と輸送」』の報告
30 ○ ガラス転移と周辺分野の科学
36 物性研究所談話会
37 物性研究所セミナー
物性研ニュース
42 ○ 平成28年度前期共同利用の公募について
○ 平成27年度後期共同利用課題一覧について
43 ○ 人事異動
44 ○ 東京大学物性研究所研究員の公募について
45 ○ 東京大学物性研究所研客員教授(准教授)公募のご案内
編集後記

東京大学物性研究所
Copyright ©2015 Institute for Solid State Physics,
The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

リチウムイオン電池が充放電する際の電極の詳細な電子状態を観測

－ 軟 X 線発光分光法により充放電に伴う電子の振る舞いが明らかに －

産業総合技術研究所　　朝倉 大輔、細野 英司
LASOR 軌道放射物性研究施設　　原田 慈久

研究の背景と経緯

近年、ハイブリッド自動車や電気自動車等の二次電池として、高エネルギー密度を有するリチウムイオン電池(Lithium-ion battery; LIB)[1]が広く用いられています。LIB に求められる性能としては、高容量、高出力、高サイクル特性(高安定性、長寿命)、低コスト等が挙げられます。これらの性能を向上させるためには、既存材料の充放電機構を解明し、その知見に基づく新材料の設計が重要です。特に正極材料は電池容量や駆動電圧を左右します。正極は一般に、粉末状の正極材料(正極活物質)にカーボンなどの導電助剤と PVDF などの結着剤を混合したスラリーを Al 集電体に塗布、乾燥、圧着した合剤電極となっており(図 1)、各部位や相界面における反応機構を解明するために、様々な分析が行われています。正極において、充電時には電気化学的な Li^+の脱離反応、放電時には Li^+の挿入反応が生じています。この Li^+のインターカレーション反応において、ホスト構造では電荷補償、即ち酸化還元反応に伴った結晶構造変化が生じ、電極性能の決定要因の一つとなります。したがって、正極材料の反応機構を解明するためには、構造解析による結晶構造変化の追跡のみでは不十分であり、構造変化に影響を及ぼす電子状態変化の解明が鍵となります。

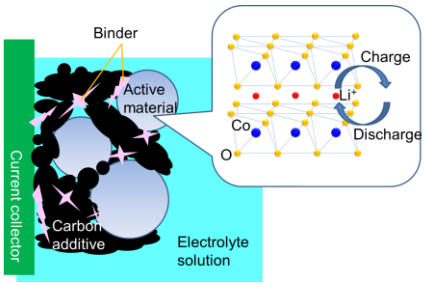


図 1. Li イオン電池の代表的な正極活物質 $LiCoO_2$ を用いた場合の充放電の模式図

電子状態解析の手段として、遷移金属 K 吸収端の X 線吸収分光(X-ray absorption near edge fine structure; XANES)が広く用いられていますが、XANES では遷移金属元素の 1s → 4p 遷移が優勢であるため、最も重要な 3d 軌道の詳細な情報を得ることが困難です。一方、軟 X 線吸収分光(Soft X-ray absorption spectroscopy; XAS)や軟 X 線発光分光(Soft X-ray emission spectroscopy; XES)では、遷移金属元素の 2p → 3d 遷移や軽元素の 1s → 2p 遷移を直接的に捉えることができ[2]、充放電に最も重要な電子軌道の情報を元素選択的に得ることができます。また、蛍光収量 XAS[3]及び XES においては、光電子分光よりも検出深度が格段に深い(数 100 nm 程度)という利点があります。しかしそれでも、通常の XAS、XES 実験では試料を真空中に置く必要があり、大気圧実験用のセルを用いて試料を真空隔離膜(Si_3N_4)に塗布する方法では X 線照射によって試料が窓材から剥離してしまうという問題があり、電池非破壊の *In situ* 測定や充放電動作下(オペランド)測定は困難を極めてきました。そこで本研究では、Si_3N_4 の薄膜窓材に、集電体層と試料である正極薄膜を多層膜として直接作製し、後から軟 X 線が出入りする開口部の Si 基板をエッチング処理するという方法で特殊電極チップを作製しました。(図 2)。このチップと金属 Li 対極、1M $LiClO_4$/EC-DEC 電解液(EC:エチレンカーボネート、DEC:ジエチルカーボネート)からなる LIB の電極用のオペランドセル(以降 LIB 用オペランドセル)を用いることによって、充放電動作下における詳細な電子状態解析を初めて実現しました。

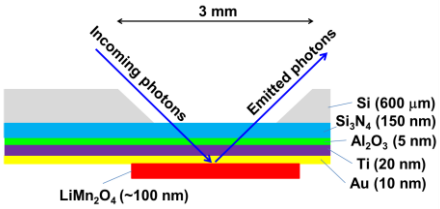


図 2. 本研究で用いた特殊電極チップの断面図

本研究で測定対象とした正極材料のスピネル型 $LiMn_2O_4$[4]は、理想的には Mn^{3+}と Mn^{4+}を同じ比率で持っています。式(1)に示すように、充電過程では Li^+脱離に伴って、Mn^{3+}サイトが Mn^{4+}状態に酸化されると考えられています。放電過程ではこの逆をたどります。

$$LiMn^{3+}Mn^{4+}O_4 \rightleftharpoons Li^+ + e^- + Mn^{4+}{}_2O_4 \qquad (1)$$

この反応は、4 V(vs. Li/Li$^+$; 以下の電位も同様に、対 Li 酸化還元電位)付近で進行することから、4 V 級正極材料と呼ばれています。4.3 V 程度まで充電すると、全ての Li$^+$が脱離されますが、ホスト構造である Mn_2O_4 は、フレームワークとして維持されることが分かっています。このように Mn の酸化還元反応が $LiMn_2O_4$ を正極に持つ電池の特性を決めると理解されていますが、一般に Mn 酸化物は Mn-O 間の強い軌道混成があることが知られており、Li$^+$脱挿入反応における O の役割は必ずしも明らかになっておりません。本研究では、この配位子との混成に敏感な XES を用いることにより、Mn の価数変化とともに O の役割を議論しました。

実験結果

はじめに、LIB 用オペランドセルに装着しそのまま X 線照射できる状態で、ポテンショスタットを用いてサイクリックボルタンメトリー(電圧掃引速度は 0.5 mV/sec)にて充放電測定を実施しました。図 3 に XES 測定前の第一充放電サイクルの結果を示します。充電過程では、4.04 V、4.20 V に $LiMn_2O_4$ 特有[5]の二つの酸化ピークが、放電過程では 3.94 V と 4.12 V に二つの還元ピークが見られます。

このように、オペランドセルを用いても、通常のビーカーセルやコインセルなどを使った電気化学試験と同等の充放電を行えていることを確かめた上で、XES 測定を実施しました。XES には SPring-8 BL07LSU(東京大学アウトステーション)敷設の超高分解能発光分光器 HORNET[6]を用いました。変化を捉える元素は Mn です。実験は電解液浸漬前の $LiMn_2O_4$ 薄膜と、第二サイクルの充電前(3.4 V)、充電時(4.5 V)、放電時(3.0 V)での定電位オペランド環境下にて実施しました[7]。XES において特定の Mn サイトを選択するために、$LiMn_2O_4$ 薄膜に対して Mn L_3(2p$_{3/2}$→3d 遷移)XAS 測定を実施しました(図 4)。理論計算[8]や関連物質の Mn L_3 XAS[9]との比較から、得られた結果は Mn^{3+}と Mn^{4+}から成る多重項構造で説明でき、L_3 ピークのうち、642.4 eV が Mn^{3+}、643.6 eV が Mn^{4+}の最大ピーク位置と判断できました。そこで、それぞれの価数を選択する励起光(入射光)を用いて共鳴 XES を実施しました。

図 5 に電解液浸漬前の $LiMn_2O_4$ 薄膜、およびオペランド環境下の Mn^{3+} 選択励起 Mn 2p XES を示します[7]。各スペクトルとも、0 eV のピークが弾性散乱、1-6 eV が 3d 軌道内の電子励起(dd 励起)、6 eV 以上が O 2p-Mn 3d 間の電荷移動励起に対応します。過去の Mn 酸化物の報告例[10,11]と比較して、XES でも電解液浸漬前は Mn^{3+}と Mn^{4+}が共存している状態と考えられます。$LiMn_2O_4$ における Mn の形式価数は+3.5 価ですから、妥当な結果が得られています。また、第二サイクル充電前(3.4 V)のスペクトルは、電解液浸漬前のものと良く一致します。これは、第一充放電サイクルにおける Mn の酸化還元反応が可逆的であることを示していると同時に、オペランドセルを使った XES 測定に成功していることを意味します。一方、充電時(4.5 V)のスペクトルは、電解液浸漬前、及び充電前のものと比較して形状が大きく異なります。この変化は、Mn^{3+}成分が Mn^{4+}に酸化されたことを示唆しています。まず dd 励起の強度が

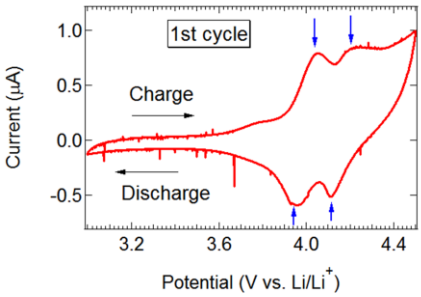


図 3. サイクリックボルタンメトリーで求めた $LiMn_2O_4$ 正極の充放電特性。青矢印は $LiMn_2O_4$ 正極材料の酸化ピーク（凸側）、還元ピーク（凹側）を表す。

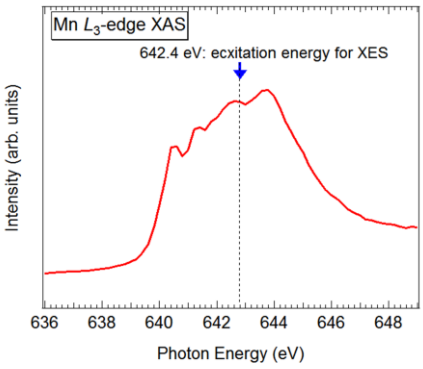


図 4. 真空隔離膜上に作成した $LiMn_2O_4$ 薄膜の蛍光収量による Mn L_3 端吸収スペクトル。

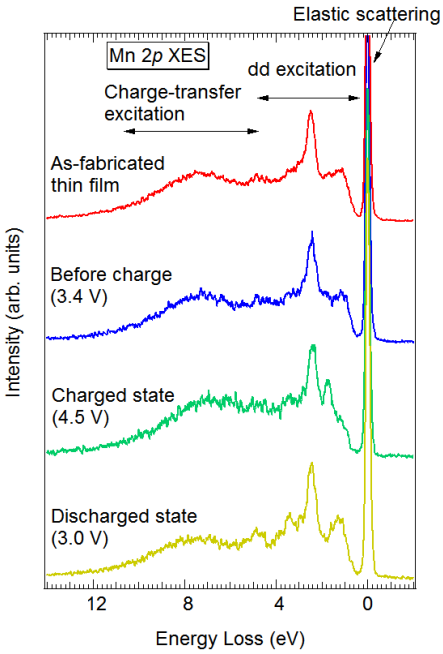


図 5. 真空隔離膜上に作成した $LiMn_2O_4$ 薄膜の各充放電状態における Mn L_3 端共鳴 XES スペクトル。

減少しています。入射光が Mn^{3+}を選択していること、またこの領域は定性的には占有状態側の Mn 3d 軌道に対応することから、強度の減少は酸化反応の証拠と言えます。これに対して電荷移動励起の強度は相対的に増大しています。充電状態はほぼ Mn^{4+}成分のみと仮定すると、Mn^{4+}状態では O 2p→Mn 3d という電荷移動が強まっていると考えられます。放電時(3.0 V)の状態は電解液浸漬前及び充電前の状態にかなり近いため、XES 測定時にも可逆的な酸化還元反応を観測できたと言えます。Mn^{3+}、即ち高スピン状態の d^4 電子配置では一般的に Jahn-Teller 効果が生じやすいため、今後、第一原理計算を用いて高分解能 XES で得られた微細な dd 励起のピークを帰属することで Mn 3d 電子軌道の詳細が明らかになり、Jahn-Teller 効果の有無等の議論が可能になると考えています。

今回の結果から、オペランド Mn 2p XES によって Mn^{3+}⇔Mn^{4+}の可逆的な酸化還元反応を捉えるとともに、この価数変化において電荷移動励起が大きく変化することが明らかになりました。電荷移動励起が大きい Mn^{4+}状態においては O 2p→Mn 3d の電荷移動効果が強まっているので、実効的に O 2p 軌道の正孔が増大していることが示唆されます。言い換えると、Mn 3d 軌道に加えて、軌道混成を介して O 2p 軌道が酸化還元反応に大きく寄与していると考えられます。また、充放電を繰り返し行うと、軌道混成の強さが大きく異なる Mn^{3+}状態と Mn^{4+}状態を何度も往復することになり、この状態変化の繰り返しによって、Mn-O 間の結合にも機械的ストレス等の影響が出ると考えられ、$LiMn_2O_4$ のサイクル劣化の要因の一つであると考えられます。実際、放電時と充電前のスペクトルは完全には一致しておらず、その差は Mn^{3+}成分の蓄積に対応していることがわかりました[7]。

今後の展開

今回得られた酸素の役割は、XES の特徴の一つである電荷移動励起の観測を活かすことによって導かれたものです。また高分解能測定ならではの dd 励起の微細な変化を捉えることで、電子構造の精緻な議論が可能となりました。従来の Mn $L_{2,3}$ XAS でも Mn^{3+}⇔Mn^{4+}の価数変化を確認することは可能ですが、高分解能 XES では励起エネルギーを適切に選ぶことで特定の価数状態を強調させることができるため、LIB のような酸化還元反応を伴う系のオペランド電子状態解析に非常に適した手法であると言えます。

本研究では、特殊電極チップならびにオペランドセルの開発により、これまで不可能であった電解液を伴う LIB 電極のオペランド XES を実現しました。軟 X 線を用いた測定により、遷移金属 3d 軌道の詳細が明らかになり、また、電荷移動効果を通じて配位子元素の役割の解明にも至りました。従来、電気化学、特に二次電池分野で単純な価数変化で議論が行われていた遷移金属の酸化還元反応は、3d 軌道と配位子 2p 軌道との混成によって、複雑な様相を呈していることが明らかとなりました。今後は元素選択性を活かして酸素側の変化も捉え、より深く配位子 2p 軌道の役割を解明することが重要と考えられます。現時点で、本手法の適用は真空隔離窓材上に直接製膜した薄膜電極に限定されていますが、一般的な電極に用いられている粉末試料にも適用することが今後の課題です。また、負極材料や電解液への適用も図り、LIB の各部位での反応を総合的に、元素選択的に理解することで、電池の高性能化につながることが期待されます。

謝辞

本研究は、東京大学の丹羽秀治博士(現：筑波大学)、木内久雄氏、宮脇淳助教、尾嶋正治名誉教授、産業技術総合研究所の難波優輔博士(現：九州大学)、大久保將史主任研究員(現：東京大学)、松田弘文主任研究員との共同研究であり、この場を借りて御礼を申し上げます。本研究は東京大学放射光連携研究機構、及び東京大学物性研究所軌道放射物性科学研究施設の共同利用(課題番号：2012B7437, 2013A7445, 2013B7460)と科学研究費若手 B(課題番号 25871186)、経済産業省の受託事業「日米エネルギー環境技術研究・標準化協力事業(平成 22～26 年度)」の支援を受けて行われました。

参考文献

[1] J. B. Goodenough and K.-S. Park: J. Am. Chem. Soc. **135**, 1167 (2013).

[2] F. de Groot and A. Kotani: “Core Level Spectroscopy of Solids” (CRC Press Boca Raton, Florida, 2008).

[3] S. Eisebitt, T. Boske, J.-E. Rubensson and W. Eberhardt: Phys. Rev. B **47**, 14103 (1993).

[4] M. M. Thackeray, W. I. F. David, P. G. Bruce and J. B. Goodenough: Mater. Res. Bull. **18**, 461 (1983).

[5] Y. Xia and M. Yoshio: J. Electrochem. Soc. **143**, 825 (1996).

[6] Y. Harada, M. Kobayashi, H. Niwa, Y. Senba, H. Ohashi, T. Tokushima, Y. Horikawa, S. Shin and M. Oshima: Rev. Sci. Instrum. **83**, 013116 (2012).

[7] D. Asakura E. Hosono, H. Niwa, H. Kiuchi, J. Miyawaki, Y. Nanba, M. Okubo, H. Matsuda, H. S. Zhou, M. Oshima *et al.*: Electrochem. Commun. **50**, 93 (2015).

[8] F. M. F. de Groot: J. Electron Spectosc. Relat. Phenom. **67**, 529 (1994).

[9] H. Wadati, D. G. Hawthorn, T. Z. Regier, G. Chen, T. Hitosugi, T. Mizokawa, A. Tanaka and G. A. Sawatzky: Appl. Phys. Lett. **97**, 022106 (2010).

[10] A. Agui, S. M. Butorin, T. Käämbre, C. Såthe, T. Saitoh, Y. Moritomo and J. Nordgren: J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1772 (2005).

[11] G. Ghiringhelli, A. Piazzalunga, X. Wang, A. Bendounan, H. Berger, F. Bottegoni, N.Christensen, C. Dallera, M. Grioni, J.-C. Grivel *et al.*: Eur. Phys. J.-Spec. Top. **169**. 199 (2009).

単一原子層表面超伝導体のステップにおける ジョセフソン渦糸の実空間観察

ナノスケール物性研究部門　　長谷川 幸雄

物質表面では、バルクとは異なる性質を示すことがある。例えば、シリコンなどの半導体でも、表面での原子配列の再構成あるいは異種元素吸着による電子状態の変化により、表面のみ金属的性質を示す場合があることが、これまでの表面科学研究により知られている。最近、こうした表面金属相の中で、低温で超伝導特性を示す系が見出されて注目を集め、究極的な二次元超伝導体として精力的に研究がなされている[1-4]。

表面には、試料作製時のミスカットや吸着および原子再構成に伴う歪緩和により、単原子層からなる段差、いわゆる、ステップ構造の存在が不可避である。表面金属電子系にとって、こうしたステップ構造は、原子配列の並進対称性を乱す欠陥であり、その輸送特性に大いに影響を与えることが予想される。本研究では、単一原子層からなる表面超伝導体の特性がステップ構造により被る影響を評価すべく、走査トンネル顕微鏡(scanning tunneling microscopy; STM)による実空間観測を行っている。STM では、トンネル分光による超伝導ギャップの測定から、原子スケールでの空間分解能での超伝導特性分布を観測できるので、この機能を用いて、表面超伝導体のステップ近傍での局所的な超伝導特性を明らかにしている。

本研究では、磁場印加時の超伝導特性分布像から、ステップ近傍には、特異な形状を示す渦糸(量子化磁束)構造が形成されることが見出された。その形状や超伝導特性の強度(ギャップの深さ)を理論計算結果と比較することにより、この渦糸構造がジョセフソン接合部分に生成されるジョセフソン渦糸構造と判明した。これまでの内橋らによる超伝導臨界電流の測定[2]から、ステップ構造がジョセフソン接合として機能することが示唆されていたが、このことを直接的に検証できたものと言える[5]。

なお、本研究は、物質・材料研究機構、国際ナノアーキテクトニクス研究拠点の内橋隆グループ、胡暁グループとの共同研究によるものである。

本研究で用いた試料は、シリコン(111)面の基板上に約一原子層のインジウムを蒸着して作製した Si(111)-($\sqrt{7}\times\sqrt{3}$)-In と呼ばれる表面再構成構造である。先行研究による電気伝導測定[2]により、臨界温度は 2.8 K であることが明らかになっている。臨界温度以下では、同表面構造は超伝導状態になっており、状態密度に相当するトンネル分光スペクトルには、フェルミ準位を中心とする超伝導ギャップが観測される。超伝導が弱くなるとギャップは浅くなり、壊れると完全に消失するので、フェルミ準位すなわちバイアス電圧ゼロでの電気伝導度(zero bias conductance; ZBC)が超伝導特性の目安となる。表面を走査しながら各点での ZBC 値を像にすることにより、超伝導特性の実空間分布像が得られる。

表面に対して垂直方向に磁場を印加すると、コヒーレンス長程度の領域で超伝導が壊され、量子化された磁束が貫く渦糸構造が形成される。ZBC 像では、ZBC 値の高い円形領域として観察される。ステップ構造のある表面における磁場下での ZBC 像には、平らなテラス上での円形構造(渦糸)に加えて、特異な形状を持つ超伝導破壊領域(高 ZBC 領域)がステップ近傍に観察された。ステップでの超伝導破壊領域は、ステップ方向に沿って伸びた細長い形状をしており、かつその中心部では超伝導ギャップが残っている。これらの性質は、ジョセフソン渦糸と呼ばれる構造の特徴と合致することから、ステップ構造がこの表面超伝導相に対してジョセフソン接合として働き、磁場下ではジョセフソン渦糸構造が形成されたものとして結論付けている。

図 1 (a)は、この表面の STM 像であり、4 つの単原子層ステップ構造が見えている。(b)(c)(d)は、(a)と同じ領域で、垂直印加磁場を減らしつつ観測した ZBC 分布図である(測定温度は 0.5 K)。図 1(b)では、テラス部分に、明るい円形状の構造が三角格子状に配列している様子が観察される。これが、超伝導体中への磁場印加により形成される渦糸構造であり、磁束貫通に伴い超伝導が破壊され、超伝導ギャップが潰れて ZBC 値が高くなり、ZBC 像では明るくコントラストされている領域である。(b)から(d)へと印加磁場の減少に伴い、渦糸構造の数が減っている様子が見て取れる。

磁場をゼロにすると(図 1(d))、テラス上の渦糸は全て消失するのに対し、ステップ近傍では明るい領域が残っている。印加磁場によってその位置が変化していることから(例えば、図中 A と A')、この明るい領域は、渦糸構造がステップ構造によりピン止めされたものであることを示しており、ステップ構造自体により超伝導特性が弱められたものではない。

ステップ近傍で観察される渦糸構造は、テラス部分の渦糸構造と異なり、特異な構造を示す。テラスの渦糸は円形状であるのに対し、ステップでのそれは歪んでおり、ステップ方向に伸びた細長い形状をしている。ZBC 分布プロット(図 1(e))から判るように、中心での ZBC 値は、ステップに現れる構造(A'、B'、C'、C)では、テラス部分の渦糸(D)に比べ低くなっており、超伝導特性が中心部においても残っていることを意味している。

ジョセフソン接合部での臨界電流 J_c は、他の超伝導領域での値 J_0 に比べ小さくなる。このため、接合部に形成される渦糸では、周回する超伝導電流の分布が大きく変形され、それに伴い、渦糸芯は$(J_c/J_0)^{-1}$ 倍だけ接合方向に伸びた形状となる。さらに渦糸芯での超伝導破壊も、J_c/J_0 の減少に伴い弱くなる[6]。同様の構造は、二次元層からなる超伝導体に対して層に平行に磁場を印加した場合[7]でも存在することが知られており、接合部分に対してほぼ平行に超伝導電流が流れ、かつ芯での超伝導破壊が十分に低いとき、ジョセフソン渦糸と呼ばれる。

このシナリオを確認すべく、二次元の強結合モデルに対してボゴリューボフ・ドジャン方程式を適用した数値計算を行っている。ジョセフソン接合部でのホッピング積分 t_s は、他の部分での値 t より小さいとしており、このとき、臨界電流の比(ジョセフソンパラメータ)J_c/J_0 は、t_s/t に相当する。

図 1(f)と 1(g)は、t_s/t = 0.4 と 0.1 としたときの接合付近での渦糸の ZBC 分布像である。円形分布となる t_s/t = 1 の場合とは大きく異なり、中心部での ZBC 値は、t_s/t の減少とともに小さくなり、その形状は楕円状となる。これらの性質は、図 1(d)で観察される A'、B'、C'の渦糸構造と対応しており、例えば、B'の渦糸に対しては、J_c/J_0 の値は約 0.4 と見積もられる。C'の渦糸では、さらに弱い接合となっており、その特徴から明らかにジョセフソン渦糸と呼ぶことができる。

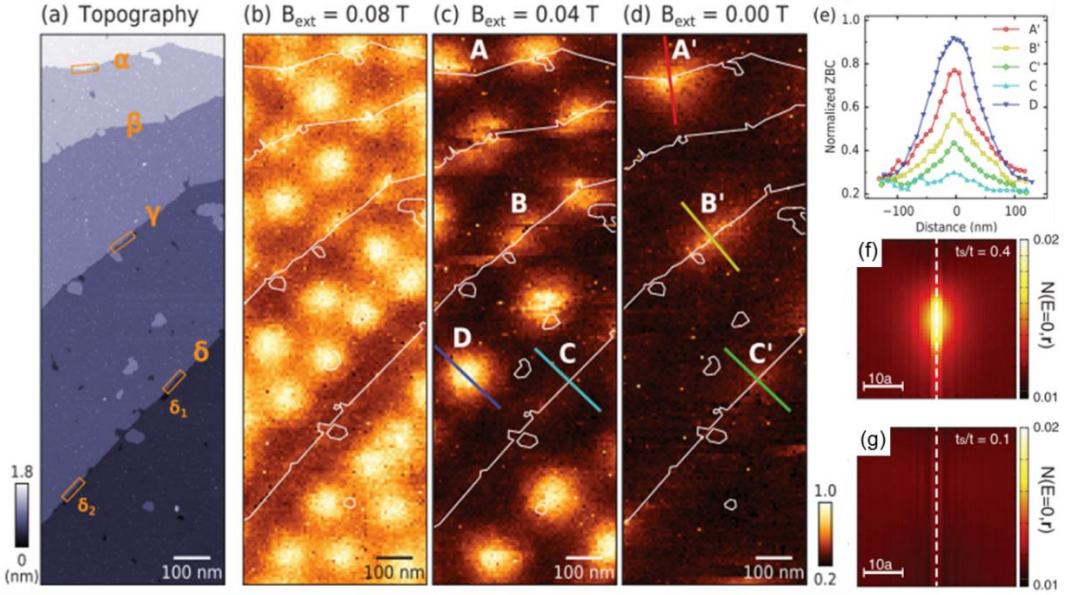


図 1 (a) Si(111)-($\sqrt{7}\times\sqrt{3}$)-In 表面の STM 像。4 つの単原子層ステップ構造が観察されている。観察領域の広さは 500 nm×1500 nm。(b)-(d) (a)と同じ場所で、垂直磁場下で測定された ZBC 像。印加磁場は (b) 0.08 T、(c) 0.04 T、(d) 0 T。(e) (c)と(d)の ZBC 像中の各ラインに沿って測定した ZBC 値の分布。(f) (g) 数値計算により求められたジョセフソン接合付近での ZBC 値の分布像。用いたホッピング積分の比 t_s/t は、(f) 0.4、(g) 0.1。

[1] T. Zhang *et al.*, Nat. Phys. 6, 104 (2010).
[2] T. Uchihashi, P. Mishra, M. Aono, and T. Nakayama, Phys. Rev. Lett. 107, 207001 (2011).
[3] M. Yamada, T. Hirahara, and S. Hasegawa, Phys. Rev. Lett. 110, 237001 (2013).
[4] C. Brun et al., Nat. Phys. 10, 444 (2014).
[5] S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, Y. Nagai, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, Phys. Rev. Lett. 113, 247004 (2014).
[6] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, Rev. Mod. Phys. 66, 1125 (1994).
[7] P. J. W. Moll, L. Balicas, V. Geshkenbein, G. Blatter, J. Karpinski, N. D. Zhigadlo, and B. Batlogg, Nat. Mater. 12, 134 (2013).

電子軌道の量子揺らぎによる新しい超伝導の発見

新物質科学研究部門　　松本 洋介、中辻 知

研究の背景

超伝導の研究は物質科学の中心的なテーマの一つであり続けてきました。特に室温超伝導の実現が現代物質科学の大きな目標の一つであることは疑う余地がありません。エネルギー損失のない送電や蓄電によるエネルギー問題の解決にとどまらぬ大きなインパクトを社会にもたらすと考えられます。さて、超伝導発現のメカニズム、すなわち電子同士がクーパー対を形成する“引力”の起源は、古くから知られている従来の超伝導体、BCS 超伝導体の場合、格子振動であることが既に分かっています。ごく最近、超高圧下の硫化水素において転移温度 200 K の BCS 超伝導が報告され[1]大変話題になっておりますが、一方で、近年 BCS 超伝導を超える高い転移温度を達成できるとして大きな注目を集めてきた銅酸化物高温超伝導体等の場合は、スピンの磁気的な揺らぎが重要な役割を果たすと考えられています。

磁気的な揺らぎによる超伝導を研究する上で格好の舞台を提供する物質群として、重い電子系と呼ばれる一連の希土類を含んだ金属間化合物が良く知られています。これらの物質では、局在性の強い *f* 電子がその性質を決めるうえで重要な役割を果たしますが、その特徴的なエネルギースケールが小さい為、磁場や圧力によって、低温での物質の状態を大きく変えることが可能です。特に、局在した *f* 電子の磁気モーメントが秩序化した状態を、*f* 電子が固体中の他の伝導電子との相互作用(混成)を通じて伝導する“重い電子状態”に変化させることができます。これは伝導電子が *f* 電子の磁気モーメントを遮蔽する近藤効果と伝導電子を介して *f* 電子間に働く RKKY 相互作用の拮抗によって生じると考えられます。興味深いことに、“量子臨界点”と呼ばれる、この二つの異なる状態間の量子相転移が起きる磁場や圧力の近傍で、従来の BCS 超伝導とは異なる超伝導が数多く見つかってきました(図 1a)。これは量子臨界点近傍で磁気的な揺らぎを媒介とした超伝導が生じていることを意味すると考えられています。

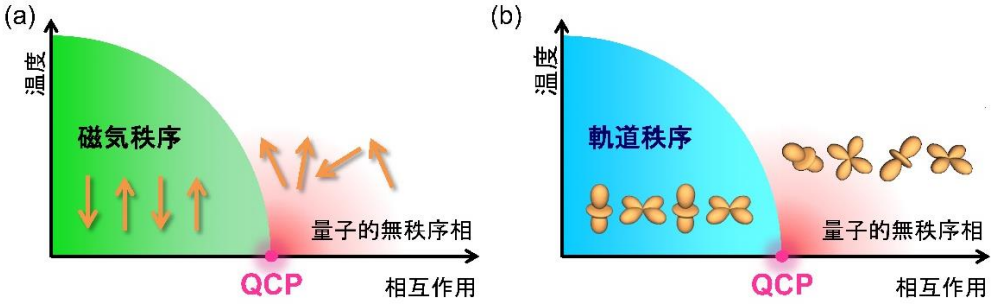


図 1: (a) 磁気秩序が抑制されることで生じる量子臨界点の概念図。(b) 軌道秩序が抑制されることで生じる量子臨界点の概念図。

より高い転移温度を持つ超伝導体、あるいは新たな機能性を有した超伝導体の開発において、格子振動やスピンの揺らぎに代わる、新たな“引力”の起源を見出すことは非常に有効なアプローチになります。それでは、*f* 電子の磁気的な自由度ではなくて、軌道自由度を用いた新しい超伝導は可能でしょうか。近年、鉄系超伝導体において多バンド性に起因する軌道揺らぎの重要性が指摘されていますが、私たちは、むしろ図 1a において磁気秩序が電子軌道の秩序に置き換わった場合(図 1b)、量子臨界点で何が起きるか、という点に着目しています。これは実は理論的にも実験的にもほとんど未解明の興味深い問題です。というのも *f* 電子の軌道自由度と伝導電子の混成効果そのものが既に非自明な問題だからです。この問題は不純物モデルの場合に 2 チャンネル(四極子)近藤効果として研究されており、非フェルミ液体状態や残留エントロピー等の特異な振舞いが理論的に指摘されています[2]。しかしながら、これが格子系に拡張された場合に何が起きるかはよく分かっていませんし、さらに量子臨界点で何が起きるかは全く未知の問題です。これらを実験的に明らかにする上で、*f* 電子が低温でスピンの自由度を持たず、軌道自由度のみを持つ物質が重要で、さらに混成が強く純良な試料が得られることも必要です。しかしながら、これらの条件をすべて満たす物質はこれまでのところ見出されてきませんでした。

実験結果

このような状況の下、最近、希土類金属間化合物 $PrTi_2Al_{20}$ と PrV_2Al_{20} が、上記の軌道自由度による新奇物性を研究する上で、格好の研究対象となることが明らかになってきました[3,4]。結晶中で Pr^{3+}イオンの 2 個の f 電子の配置は、フント則とスピン軌道相互作用によって全角運動量 $J = 4$ の 9 重縮退した状態が選ばれますが、この縮退は結晶場と呼ばれる周囲のイオン・原子による静電場でさらに解けます。$PrTi_2Al_{20}$ と PrV_2Al_{20} の場合、Pr 原子の位置は立方晶(T_d)の対称性を持ち、結晶場基底状態は磁気双極子の自由度を持たない非磁性のΓ_3 二重項と呼ばれる状態であることが様々な実験結果から分かっています[3-5]。また、第一励起準位は両物質とも 40 ~ 60 K 程度と十分に離れており、数 K 以下ではほとんどその影響を無視できます[3, 5]。

これらの系で重要な点は、Pr 原子の周りを 16 個の Al 原子が籠状に取り囲む構造を持つ為(図 2b 挿入図参照)、Pr 原子の f 電子と Al 原子から供給される伝導電子が強く混成している点です。特に PrV_2Al_{20} は $PrTi_2Al_{20}$ に比べて格子定数が小さく、籠のサイズが小さいため、より混成が大きいことが期待されます。実際、$PrTi_2Al_{20}$ が約 2K で軌道秩序(強四極子転移)を示す[3, 5]のに対し、PrV_2Al_{20} はより低温の 0.75 K, 0.65 K において 2 段の軌道秩序(秩序パラメータ等の詳細はまだ分かっていない)を示し[4, 6]、さらに転移温度以上での比熱、磁化、電気抵抗の温度依存性もフェルミ液体のそれから大きく逸脱したより異常な電子状態を示します[3, 4]。2 段転移の温度以下でも、比熱が温度の 4 乗に比例した冪乗則を示し、軌道揺らぎによる何らかのギャップレスモードが存在することが明らかになっています[4]。これらの振舞いは PrV_2Al_{20} が $PrTi_2Al_{20}$ に比べてより軌道秩序の量子臨界点近傍に位置する可能性を示すと考えられます。

このような強い軌道揺らぎを伴う状況の下、PrV_2Al_{20} は 0.05 K で超伝導を示します[4]。図 2a の電気伝導度測定の結果に示す通り、転移温度(T_c)は残留抵抗比(RRR)に強く依存しており、RRR ~ 7 以下の試料では超伝導は(少なくとも 20 mK 以上の温度域では)確認されていません。このことは、この超伝導が非従来型である可能性を示すと考えられ、今後のより詳細な研究が望まれます。バルクの超伝導であることは図 2b に示す比熱の測定結果の他、SQUID を用いた DC 磁化測定においても十分な体積分率の反磁性シグナル(ZFC で 82%、FC で 47%)によって確認されています。また、零磁場近傍における上部臨界磁場の温度依存性(dB_{c2}/dT = 0.41 T/K)より、クーパー対を形成する電子の有効的な質量が通常の約 140 倍まで増大し、重い電子超伝導となっていることが分かりました。図 2b から見て取れるように、転移温度直上で 0.9 J/K²mol に及ぶ大きな電子比熱係数に加え、超伝導転移に伴う比熱の飛び(を温度で割った値)が 0.3 J/K²mol と大きいことも重い電子超伝導を支持し、f 電子の軌道揺らぎを媒介とした新たな超伝導である可能性が高いと考えられます。興味深いことに、より混成が小さい $PrTi_2Al_{20}$ の場合、常圧下で電子の有効質量が通常の約 16 倍程度まで増大した超伝導が発現します(T_c = 0.2 K)が[7]、ここに圧力を加えると、約 6 GPa 以上で四極子転移温度の減少と同時に有効質量が 100 倍 (T_c ~ 1 K)まで増大します[8]。この結果は、$PrTi_2Al_{20}$ の場合も、加圧によって系を軌道秩序の量子臨界点に近づけ、軌道揺らぎによる超伝導を発現させることが可能であることを示すと考えられます。

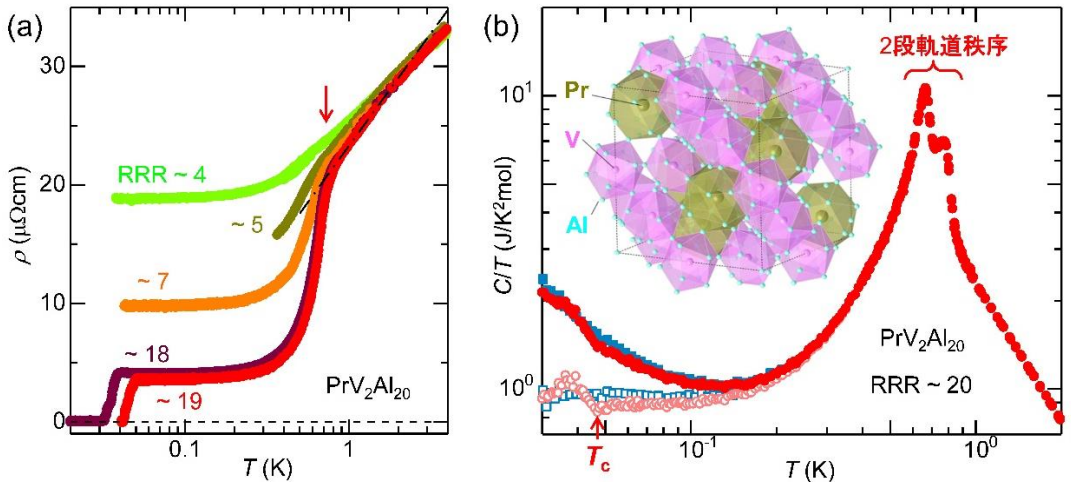


図 2: (a) PrV_2Al_{20} の電気伝導度 ρ の温度依存性。0.7 ~ 0.8 K 付近の矢印は多極子転移に対応します。電気伝導度においては 2 段転移は明瞭に観測されません。(b) PrV_2Al_{20} の比熱 C の温度(T)依存性を C/T 対 T の両対数プロットとして示した図。赤丸がゼロ磁場、青四角が[110]方向に 30 mT の磁場を印加した場合で、白抜きシンボルではここからさらに核比熱の寄与を差し引いています。超伝導転移による大きな比熱の飛び$\Delta C/T$ ~ 0.3 J/K²mol および大きな電子比熱係数 γ ~ 0.9 J/K²mol が見て取れます。挿入図は PrV_2Al_{20} の結晶構造。

今後の展開

本稿で紹介した電子軌道の量子揺らぎによる新しい超伝導の発見は、最近の物質開発の進展によってもたらされた「軌道揺らぎを用いた新奇物性開拓」の顕著な一例となると思われます。今後はこれをより確実なものとすること、すなわち、*f* 電子の軌道自由度と伝導電子の混成効果(四極子近藤効果)、軌道揺らぎの効果について、より直接的な証拠を得ることが重要になると思われます。そのためには微視的なプローブも含め、より多角的な実験手法を組み合わせ、さらに磁場、圧力などのコントロールパラメータを駆使して研究を進めることが必要になります。また、現状では単結晶試料の RRR は PrV_2Al_{20} の場合 20 程度が最高値となっていますが、これをさらに凌ぐ純良単結晶の合成は重要な課題です。結晶のさらなる純良化によって、超伝導転移温度が大きく増大するのではないかと私たちは期待しています。また、同じく非磁性 Γ_3 結晶場基底状態を持つ $PrIr_2Zn_{20}$[9]においても、最近、混成の効果が指摘されるなど研究は拡がりを見せています。これらの物質を統一的に理解することができるのか否か、今後の進展に期待が集まっています。

謝辞

最後に、本稿で紹介した研究は物性研究所・新物質科学研究部門・中辻研究室の酒井明人(現アウグスブルグ大学)、辻本真規、冨田崇弘の各氏を始めとした多くの方々との共同研究によるものです。また物性研究所の榊原俊郎教授、志村恭通博士、荒木幸治博士(現防衛大)、上床美也教授、松林和幸助教(現電通大准教授)、鈴木淳一郎氏、上田和夫教授、服部一匡助教(現首都大准教授)、久我健太郎博士(現理化学研究所)、E. C. T. O'Farrell 博士(現シンガポール大学)、また琉球大学の柄木良友教授、トロント大学の Y.-B. Kim 教授には有用なコメントや実験上のサポートをいただきました。また、試料合成、組成分析等において物性研究所・物質設計評価施設の設備を利用させていただきました。ここに御礼申し上げます。また、本研究は科学技術振興機構 PRESTO、日本学術振興会・科学研究費補助金(No. 25707030, 90422443)、文部科学省・科学研究費補助金・新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」の援助を受けて行われました。

参考文献

[1] A. P. Drozdov *et al.*, Nature **523**, 72 (2015).
[2] D. L. Cox, PRL **59**, 1240 (1987).
[3] A .Sakai and S. Nakatsuji, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 063701 (2011).
[4] M. Tsujimoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **113**, 267001(2014). *References there in*.
[5] T. J. Sato *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 184419 (2012).
[6] K. Araki *et al.*, JPS Conf. Proc. **3**, 011093 (2014).
[7] A .Sakai *et al*, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 083702 (2012).
[8] K. Matsubayashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 187004(2012).
[9] T. Onimaru *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 177001 (2011).

「京」を用いた大規模分子動力学法による気泡間相互作用の解明

渡辺 宙志

この度、私がスーパーコンピュータ「京」を用いて得た「気泡生成過程におけるオストワルド成長の大規模分子動力学計算」という成果が、米国物理学協会 (American Institute of Physics, AIP) からプレスリリースされました。本稿ではこの研究と、プレスリリースの経緯について簡単に紹介させていただきたいと思います。

水を加熱すると沸騰して水蒸気になり、蒸気の力でタービンを回すと発電することができます。熱源は様々ですが、現在私達が利用する電力の大部分はこの形で生み出されています。しかし、加熱された水のどこからどのように気泡が発生し、気泡がどのように相互作用し、流れにどのような影響を与えているのか、その詳細はほとんどわかっていません。このように、気相と液相がお互いに相転移しながら加熱されつつ流れていく系を気液混相流と呼び、工学応用上極めて重要な研究対象ですが、強い非平衡状態であること、ミクロな相転移からマクロな流動まで共存するマルチスケールな問題であることなどが解析を難しくしています。数値計算課題としては、相転移により相界面が生成消滅すること、熱伝導や摩擦など、界面を通じた物理量の輸送がほとんどわかっていないことなどの困難があります。

私はこの問題を、分子動力学法を用いた全粒子計算で解決すべく、日々研究に取り組んでいます。全粒子計算とは、系を構成する分子を全て陽に扱い、分子間相互作用のみを仮定し、あとは分子動力学法 (Molecular Dynamics Method, MD)で力任せに解く、という方法論です。全粒子計算を行えば、相界面は自発的に生成、消滅し、さらにこれまで経験的に与えるほかなかった界面における輸送についても考慮せずにすみます。ただし、支配方程式が単純になる代償として、そのマルチスケールな問題を分子レベルから解像するために大規模計算が必須となります。そこで我々は、超並列計算機向けの大規模 MD コードの開発を進めてきました。目標は「京」上での計算ですが、いきなり数万並列の計算を実行するのは難しいため、まず当時の物性研システム B (SGI Altix ICE 8400EX) にて並列化アルゴリズムのテストを、「京」互換のアーキテクチャであるシステム C (FUJITSU PRIMEHPC FX10) にてチューニングを行い、実行効率を向上させました。さらに東大情報基盤センターの FX10 全系、1PFlops の計算を行い、高い並列化効率と実行効率が出ること、ファイル入出力を含め、実用的な気泡生成シミュレーションが実行できることを確認し、「京」を使う準備は整いました。その後、「京」の一般利用枠に課題が採択され、いよいよ「京」でシミュレーションを行うことになりました。

気泡が生成しつつ流動する気液混相流の全粒子計算には一兆個以上の粒子が必要と見込まれており、これは「京」全系を使っても到達不可能です。そこで我々はその前段階として、多重気泡生成過程のシミュレーションを行うことにしました。炭酸飲料の栓を抜くと、まず多数の泡があらわれた後、大きな気泡がより大きく、小さな気泡がより小さくなる、オストワルド成長と呼ばれる現象が起きます。オストワルド成長は一次転移を引き起こす系で普遍的に見られる現象で、その理論は 1960 年代にほぼ完成されています。しかし、理論の検証は合金系や液滴生成では行われていましたが、気泡生成系で本当に成立しているかは確認されていませんでした。また、気泡生成と液滴生成は同じ相転移の裏表ですが、準安定領域からの核生成率を予言する古典核生成論が、液滴生成はよく説明できるのに対し、気泡生成率は理論値と実測値が桁でずれてしまうという問題があり、気泡系にオストワルド成長理論が適用可能かどうかは非自明なことでした。

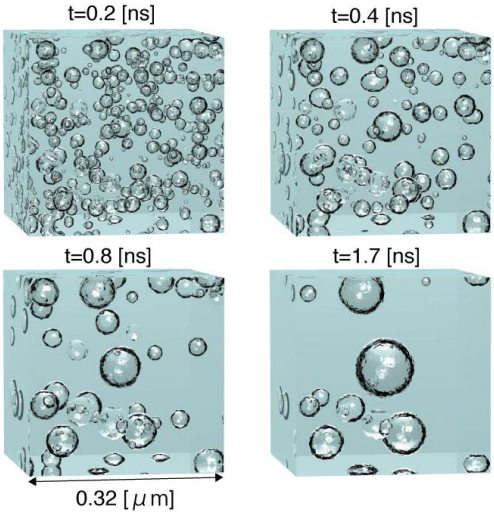


図 1: 急減圧直後の多重気泡生成からオストワルド成長。解析に用いた系は気泡が多すぎるため、小さい系を可視化している。可視化は理研の稲岡創氏に依る。

そこで我々は液体を急減圧し、気泡を多数生成させる多重気泡

生成シミュレーションを行いました。計算には「京」の 4096 ノード(32768 プロセス)を 24 時間、それを条件を変えながら 10 本、合計で 100 万ノード時間が費やされました。用いた粒子は最大で 7 億 3 千万粒子であり、このような大規模計算を行うことで、初めて気泡分布関数を古典論と直接比較できるほど精密に測定することができました。この計算により、気泡分布関数が古典論の予想通りスケーリングできること、スケーリング指数が温度により二つの値をとること、その温度依存性はダイナミクスのボトルネックに依存していること、そして二つの指数の値もそれぞれ理論で予想された通りであること等がわかりました。古典核生成論が気泡生成で破綻することから、同様な仮定を多数共有するオストワルド成長の古典論も同様に破綻しているだろう、と予想していましたが、得られた観測結果がきれいに理論通りの振る舞いを見せたのは大きな驚きでした。後に、圧力の緩和スケールが気泡成長の時間スケールが分離しており、泡がほぼ一様な圧力を感じることで平均場的な記述が正当化され得ることなどがわかって来ました。

さて、我々は得られた結果を論文にまとめ、AIP が出版する論文誌のひとつ、Journal of Chemical Physics に投稿し、掲載されることになりました。論文の掲載直前、AIP から雇われたというサイエンスライターから「あなたたちの研究が AIP プレスリリースに取り上げられることになったので、論文の解説をして欲しい」という依頼が届きました。何度かサイエンスライターとやりとりをして、「気泡成長におけるオストワルド成長の役割を探る(Exploring the Role of Ostwald Ripening in Bubble Formation)」というタイトルでプレスリリース文が確定したと思った頃、直前になって AIP メディアサービスのディレクターから「少し地味だったから、ちょっと盛ったよ(意訳)」という連絡が来て、タイトルが変更されました。こうして我々の成果は「シャンパンの泡は世界のエネルギー危機を救う？(How the Physics of Champagne and Soda Bubbles May Help Address the World's Future Energy Needs)」というタイトルでプレスリリースされました。公開が 12 月で、欧米では新年をシャンパンで祝う風習があったことも影響したのでしょう。このプレスリリースは海外で大きな反響がありました。すぐに、スミソニアン博物館のウェブニュースを始め、いくつかのニュースサイトからメールによる取材申し込みが来ました。この話題は Discovery Channel や、HPC Wire といった有名なサイトでも取り上げられ、それを参照したと思われるニュースサイトがさらにニュースを掲載し…と、多くのサイトに取り上げられました。アメリカだけでなく、スペインのニュースサイトからも取材があったり、インドの Yahoo にも掲載されたりしました。「エネルギー危機を救う？」というタイトルも「シャンパンの泡が世界のエネルギー危機を解決する」「シャンパンの泡が世界のエネルギー工学を改革する」「シャンパンの泡があなたの家を照らす：科学者が語る」と、さながら伝言ゲームのように、徐々に大げさになって伝わって行きました。なお、言うまでも無いことですが、我々の原著論文には「シャンパン」という単語は全く入っていません。一方、AIP のプレスリリースと同時に、物性研ニュースなどで我々も広報をしたのですが、「渡辺宙志助教らが「京」による大規模気泡生成シミュレーションに成功」などとカタいタイトルだったのがいけなかったのか、日本では全くといって良いほど話題になりませんでした。

図 2:スミソニアン博物館のオフィシャルマガジン「Smithsonian」のオンライン版「Smithsonian.com」。トップページに掲載された我々の成果のニュースが掲載されている。

この一連の騒動(?)は、研究のアウトリーチについて再考する良い機会になりました。同じ論文に関する広報でも、キャッチーなタイトルをつけるか否かによって注目度が全く異なります。あまり実態とかけ離れたキャッチコピーをつけたり、誤解を招く広報をしたりしてはいけませんが、やはり税金を使って研究をしている以上、その成果をわかりやすく納税者の皆さんに伝える義務はあるのだ、と痛感しました。AIP がメディアサービスの専任の人を置き、プロのサイエンスライターを雇って広報に大変力を入れていることがわかったことも有意義でした。同様に、研究成果だけでなく、研究遂行に必要な道具についても、その必要性をきちんと説明していかなければならない、と思うようになりました。

私の研究以外の主な仕事は、物性研スパコンの運用、そして調達です。物性研のスパコンは、原則として 5 年毎に更新されています。長い調達期間が終わり、今年 7 月より新しいスパコンが稼働を開始しました。総理論演算性能

2.65 PFlops は、研究所が保有するスパコンとしてはかなり大規模なものです。日本にいるとあまり意識しませんが、海外に出張した時などには、この物性研スパコンの規模の大きさが実感されます。まだ学生だった頃、海外の共同研究者に新しい計算を提案した時「それはできたら面白いが、ちょっと規模が大きすぎて計算するのは無理だ」と言われたのですが、「いや、物性研に投げたら 1 日仕事だ」と答えたら大変驚かれたことがありました。計算物理学者は、大雑把に言って普段使っている計算資源で一ヶ月を超えるような計算は、無意識に「無理」と判断してしまう傾向にあるようです。つまり、スパコンは単に「より大きな計算ができる、より早く結果を出せる」というだけでなく、それを使う研究者の想像力の限界を押し広げるツールでもあります。物性物理を研究するものにとって、物性研のスパコンが無料で気軽に使える、ということが、極めて大きなアドバンテージになっていることを実感しました。我々が日常的に使っているスパコンも、決してあって当たり前の存在ではなく、スパコンを使って日々どのような研究が行われているか、なぜスパコンが今後も必要であるかを、様々な機会に説明していかなければなりません。現在、なぜ気泡生成が液滴生成と異なるように見えるのかを解明するため、「京」フルノードを使ったさらに大規模な計算を進めています。また、「京」では流れの無い多重気泡生成まででしたが、ポスト「京」では、流れも含んだ本格的な気液混相流の全粒子計算を実施すべく、準備を進めているところです。今後も、大規模計算で初めて見える面白い物理を追究するとともに、その面白さを広く伝えることにも力を入れようと思っています。

本研究は、九州大学(当時)の鈴木将氏、理研の稲岡創氏、東大の伊藤伸泰氏との共同研究です。また論文をまとめるにあたり、川島先生、野口先生、杉野先生、常次先生、山室先生といった多くの方に助言を頂きました。「京」の全系計算の実施においては、藤堂先生を始め、CMSI 事務局の皆様、RIST の皆様に大変お世話になりました。理研 AICS の皆様には、研究成果の紹介などでお世話になりました。この場をお借りして感謝の意を述べさせていただきたいと思います。

参考文献

[1] H. Watanabe, M. Suzuki, H. Inaoka, and N. Ito, J. Chem. Phys. **141** 234703 (2014).

[2] AIP によるプレスリリース
https://www.aip.org/publishing/journal-highlights/how-physics-champagne-and-soda-bubbles-may-help-address-worlds-future

[3] Smithsonian.com の記事
http://www.smithsonianmag.com/science-nature/new-years-physics-champagne-bubbles-could-help-power-future-180953778/

電荷の不安定性による新規な量子相転移の発見

極限環境物性研究部門　　松林 和幸*、上床 美也（*現・電気通信大学）

研究の背景と経緯

電子系の自由度(電荷、スピン、軌道)に起因する多彩な相転移現象を理解することは物性物理における重要なテーマの一つですが、有限温度で起こる相転移が極低温へと抑制されたときには、熱揺らぎが抑えられることで量子揺らぎが顕在化し、室温付近とは異なる不思議な現象が観測されます。特に、絶対零度における相転移は量子相転移と呼ばれ、その近傍では量子揺らぎを反映した量子臨界現象とよばれる異常な金属状態や非従来型超伝導などの興味深い現象が観測されます。従来に報告されてきた実験および理論的研究の多くはスピン自由度に着目したものでしたが、近年、スピン揺らぎによる量子臨界現象の枠組みから逸脱した新しいタイプの量子臨界現象を示す物質が(特に *f* 電子系物質において)相次いで発見されました[1-3]。その起源をめぐってはいくつかの仮説が提唱されていましたが[4-7]、その中の一つである臨界価数揺らぎの理論では価数の 1 次相転移の終端点(臨界点)が低温まで抑制されたときに顕在化する臨界価数ゆらぎの重要性が指摘されていました。また、同理論では価数転移の量子臨界点は磁場によって制御されることが予言されていましたが、その実験的検証に成功した例はほとんどありませんでした。その理由として、精密な測定が可能な磁場範囲内において上記の振る舞いを観測するためには、高圧力などを用いて量子臨界点近傍に対象物質をチューニングする必要がありましたが、極低温、高圧力および高磁場という実験条件下での精密物性測定は大変困難なテーマでした。

実験結果

上床研究室では最近、非磁性のイッテルビウム化合物の圧力効果に着目した研究を行ってきました[8]。イッテルビウムイオンの価数が 2 価(非磁性)と 3 価(磁性)の中間価数状態をとる非磁性化合物に高圧力を加えると、3 価状態へと近づくとともに磁気秩序が誘起されることができるため、磁気的な量子臨界現象が研究できる格好の舞台となります。本研究では、常圧では非磁性の $YbNi_3Ga_9$ について、圧力誘起反強磁性秩序が出現する圧力付近で、価数クロスオーバーと価数揺らぎの量子臨界現象が関係した磁化の急激な増大を観測することに成功し、スピン揺らぎの理論では理解できなかった非従来型の量子臨界現象において価数の不安定性が果たす重要性が明らかとなり、新しい量子臨界現象の起源を解明する上で重要な指針が得られました[9]。

まず研究の手始めとして、高圧下電気抵抗と磁化率測定によって約 9 GPa(9 万気圧)以上の高圧下の低温域では反強磁性秩序状態が誘起されることを見出しました(図 1 (a))。また、臨界圧力に近づくとともにイッテルビウムの価数が 3 価状態へと連続的に変化していくことを X 線吸収分光測定によって明らかにしました(図 1 (b))。これらの結果は、良質な試料と、独自に開発した圧力装置および大型放射光施設 SPring-8 BL39XU の高輝度 X 線と高精度計測技術を利用することで初めて実現しました。さらに、極低温、高圧、磁場を組合せた多重極限環境下における精密な物性測定から、圧力誘起磁気秩序が出現する圧力よりもわずかに低圧側の非磁性相(常磁性金属相)において、メタ磁性が発現することを発見しました。また、磁場依存性におけるヒステリシスの存在と磁場中における磁化率の温度依存の発散的振る舞いから、発見された磁化の急激な増大は 1 次相転移であり、

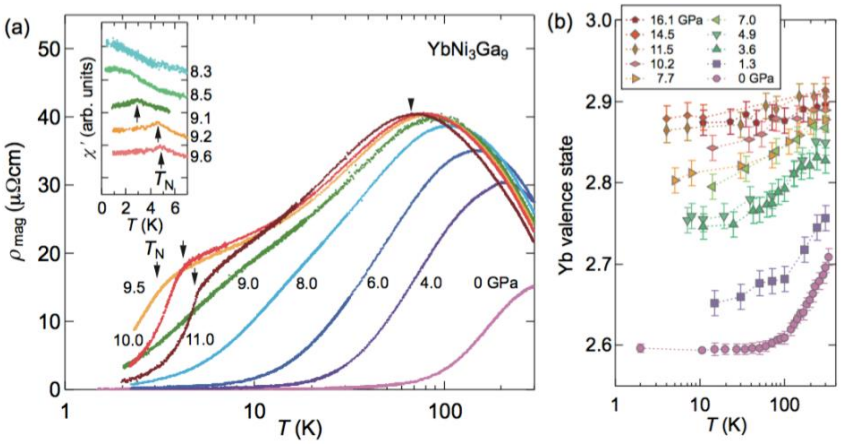


図 1 . (a) 電気抵抗率と交流磁化率(内挿図)の温度依存性 (b) Yb イオンの価数の温度依存性

その相線は臨界点をもって終端することがわかりました(図 2)。また熱力学的な関係式の解析によって、メタ磁性の起源としてイッテルビウムの価数転移が生じている可能性を見出しました。この結果は、イッテルビウムの価数の揺らぎ、すなわち f 電子の電荷移動の揺らぎが発散する臨界点で、スピンの一様な揺らぎを表す磁化率も同時に発散するという、臨界価数揺らぎの理論が予言した新現象を直接観測したものと考えられます。これらの実験事実は、価数クロスオーバー領域において磁場を加えると価数の 1 次相転移が誘起されるという理論予測とも一致しており、磁気転移点近傍に潜む価数の不安定性の存在を示す重要な結果であると考えられます。

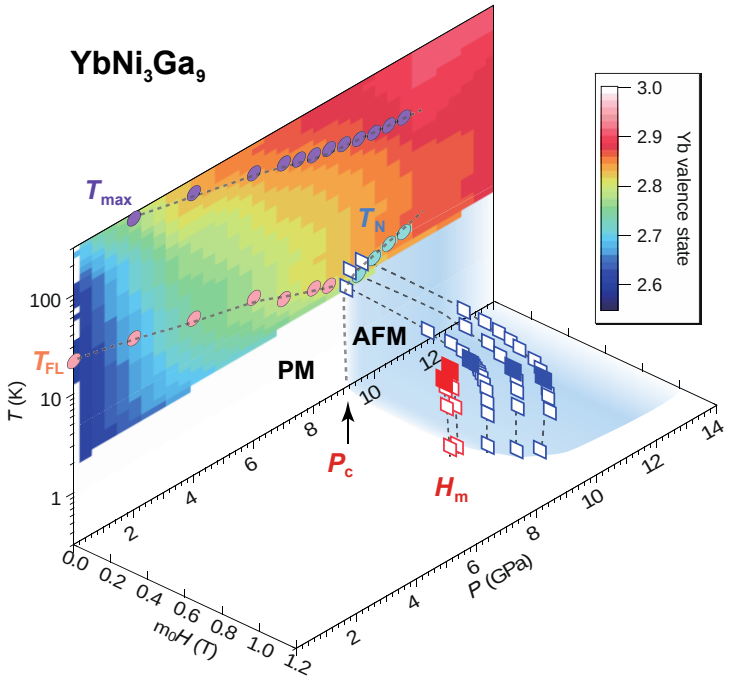


図 2．温度、圧力、磁場を複合的に制御した多重極限環境下での実験から明らかとなった $YbNi_3Ga_9$ の相図。磁気秩序は P_c(~9 万気圧)以上の高圧、T_N(~数ケルビン)以下低温領域において出現する。また、P_cよりもわずかに低圧側の非磁性相ではH_m(~0.7 テスラ)において磁化の急激な増大(メタ磁性)が発現することを発見した。1 次相転移線(赤の中白の四角のデータを結んだ線)が昇温につれて臨界点(赤塗りの四角)で終端している。

今後の展開

本研究で見出された価数クロスオーバーおよび価数の不安定性に起因する 1 次のメタ磁性転移の発見は、非従来型の量子臨界現象を理解する上で、臨界価数揺らぎの効果が重要な鍵となっていることを強く示唆しています。また、1 次相転移の臨界点が絶対零度近傍に抑制された際に、顕著な量子効果とあいまってどのような臨界現象を示すかはそれぞれの物質系の詳細によらない普遍的な問題であるため、さらなる研究の発展が期待されます。さらに、価数転移の量子臨界点近傍では超伝導相関が発達するという理論的予言もあり、非従来型の量子臨界現象の全貌の解明にむけて今後の活発な研究の展開が予想されます。

謝辞

研究成果は、物性研究所上床研究室に所属していた平山貴士氏、名古屋工業大学の山下哲朗博士、大原繁男教授、高輝度光科学研究センターの河村直己副主幹研究員、水牧仁一朗副主幹研究員、広島大学の石松直樹助教、九州工業大学の渡辺真仁准教授、高知大学の北川健太郎講師との共同研究によるものです。本研究の一部は、JSPS 科研費(課題番号 24740220, 24540389)の助成を受けたものです。また、SPring-8 長期利用課題「X線分光法による臨界価数ゆらぎによる新しい量子臨界現象の実験的検証」(実験責任者：渡辺真仁 九州工業大学 准教授、課題番号：2012B0046, 2013A0046)の一環として行われました。

参考文献

[1] P. Gegenwart *et al.,* Phys. Rev. Lett. **89**, 056402 (2002).

[2] Y. Matsumoto *et al.,* Science **331**, 316 (2011).

[3] K. Deguchi *et al.,* Nat. Mater. **11**, 1013 (2012).

[4] Q. Si *et al.,* Nature (London) **413**, 804 (2001).

[5] P. Coleman *et al.,* J. Phys. Condens. Matter **13**, R723 (2001).

[6] T. Misawa *et al.,* J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 084707 (2009).

[7] S. Watanabe *et al.,* Phys. Rev. Lett. **105**, 186403 (2010).

[8] Y. Saiga *et al.,* J. Phys. Soc. Jpn. **77** 053710 (2008).

[9] K. Matsubayashi *et al.,* Phys. Rev. Lett. **114**, 086401 (2015).

物性研に着任して

極限コヒーレント光科学研究センター　　黒田 健太

2015年4月1日付で極限コヒーレント光科学研究センターの近藤研に助教として着任致しました黒田健太と申します。宜しくお願い致します。広島大学で学生生活を送った後、海外学振を使ってドイツのマールブルグ大学で1年間修行し、現在に至ります。私が住んだ町はどこも山に囲まれていたので、平坦に拓けた柏の葉の景色は新鮮です。生活圏に店がなくさっぱりしすぎていますが、開発のポテンシャルを感じる町で、気に入っています。

これまでの私の研究にはトポロジカル絶縁体が関わっています。6 年間この物質を眺める視点を変えながら研究しております。契機は大学院進学直前、指導教員である広島大学の木村昭夫先生から「トポロジカル絶縁体の単結晶を作ってスピン分解光電子分光で測定してみない？」とお声掛けして頂いたこと。トポロジカル絶縁体？なんかかっこええ！やります！と即答しました。トポ‥？トロピカル‥？？この物質の理解はだいぶ遅れてやってきました。広島大学はキャンパス内に放射光施設があり、その恵まれた環境下で、目的に合った試料を制御して作成し電子構造を自分で測定する、をモットーに実験に励み、“放射光”を使ってトポロジカル絶縁体の“電子スピン”を含めた“静的”な美しい部分を見つけることに成功致しました。

博士課程後期進学後、一本の論文に出会いました。そこで議論されていたのは“レーザー”時間分解二光電子分光を用いて、フェムト秒という極短時間で起こる“動的”な現象でした。直感で次はこれだ！と思った私は、研究テーマを考えて海外学振に応募。運よく申請が通り、時間分解の聖地・ドイツで修行する機会を得ました。マールブルグ大学の Ulrich Höfer 先生の研究室に一年間滞在致しました。ドイツへ行ってすぐ、先生から、「レーザーのスイッチの入れ方を教えるから、休日も好きなだけ実験をしてくれ。日本人は休日も働きたいでしょう？」とのお言葉を頂き、一年間、存分に実験をさせてもらいました。わからない事があれば、すぐに聞く。助言を仰ぎ、又すぐに試す。日々、この流れの繰り返しです。レーザーに関して初心者だった私は、最初の約半年はデータが思うように出ず苦しみましたが、帰国直前、試しに行った中赤外レーザー波長依存性を使った実験が会心の一撃。一気にデータが出て、まさにドイツでの修行の成果を感じた瞬間でした。

時系列に沿って話をしましたが、一歩下がって私の研究全体を眺めると、“放射光”、“レーザー”、“静的・動的”そして“電子スピン”がキーワードになりそうです。放射光で見る物理、レーザーで見る物理、手法が変われば当然見えてくる物理、議論できる物理は異なります。視点を変えるということ。静的に見るか、動的に見るかーこれは一例ですが、革新的な事は、違う視点がうまくその物質にマッチした瞬間に起こるのだと考えます。特に光電子分光を用いた電子スピンの研究では、放射光が使用されているものの、レーザーで見る電子スピンは未開拓の部分が多いように思います。私が経験した良い具合に異なる視点を組み合わせて、物性研では革新的な電子スピンの研究開拓にチャレンジするつもりです。

極限コヒーレント光科学研究センターでは、放射光とレーザー、両方が身近にあり、その歴史、実績は確かなものです。物性研全体を見渡しても、一つのワードを通してお互いの研究を結びける事ができる、良い具合に異なる視点を持った研究室が集まっているように思います。この素晴らしい環境に私が混ざれる機会を頂けた事は、非常に幸運なことです。近藤研はまだ発進したばかりで、メンバーはまだ近藤先生と私だけですが、二人それぞれが良い具合に異なる視点を持っていると感じております。この良い具合の感じが成果に現れるよう気合を入れて研究に励んで参ります。どうぞ宜しくお願い致します。

物性研を離れて

上田 和夫

物性研での私の生活は大学院生として守谷研究室に所属することによって始まった。入学は 1973 年の 4 月で 1977 年 9 月まで充実した大学院生活を送ることが出来た。東京大学工学部物理工学科に就職し、その間 ETH チューリッヒ TM Rice 先生の研究室へ 2 年間留学し、その後筑波大学物質工学系に転職した。筑波大学の 7 年間のうち 2 年間は Paul Scherrer Institute に新しくできた物性理論グループへ参加するため再度スイスに渡航した。物性研で研究室を持ったのは 1994 年 4 月である。それから 2015 年 3 月の定年退職まで 21 年間在職したので 42 年間の研究者人生の後半半分を物性研で過ごしたことになる。

物性研の研究室では強相関電子系の典型例である重い電子系と高温超伝導の理論的研究を引き続き展開することから始めた。前者は Manfred Sigrist 氏や常次宏一氏をはじめとする研究者との共同研究であり、後者は守谷亨先生を核としたグループとの共同研究を推進した。研究室発足後、ランダウ研究所で学位を取った Mike Zhitomirsky 氏がポスドクとして来日した。また東京理科大学石井力研究室で博士課程に進学した柴田尚和氏は、物性研の留学研究員制度を利用して研究室立ち上げ時の中心メンバーとして活躍してくれた。2 年目には、助手として紺谷浩氏、ポスドクとして Matthias Troyer 氏が加わり、学生も入学して研究室は次第ににぎやかになった。1997 年には物性研の COE 研究員として武藤哲也氏も加わった。

強相関電子系の物理の本質の一つが伝導電子系が量子臨界点で示す特異性にあるとの認識が深まるにつれ、量子臨界性のプロトタイプである絶縁磁性体の秩序無秩序転移の研究に関心を持った。当時磁性絶縁体で磁気秩序がなくスピンギャップを示す物質が次々と見つかった。スピンギャップの起源を探る研究は、学生やポスドクの人達と一緒に一から物理を考える格好のテーマであった。新たなアイディアが議論され、その結果が検討されるプロセスは大変刺激に満ちた楽しい日々であった。

研究活動が軌道に乗ってくると同時に次第に研究所の運営にも参加するようになった。1996 年度から 2002 年度まで 3 年ごとの休止期間を除いて企画委員として所の運営に携わることになった。1997 年度には総長補佐として蓮実総長の大学執行部の手助けをすることになった。当時の補佐会は、総長の下、10 の学部・研究科と輪番制で選ばれた研究所出身の 2 名、合わせて 12 名の補佐と副学長、事務局長で構成されていた。補佐は理系から文系までさまざまな学問分野を背景に持つ気鋭の研究者の集団で、補佐会での議論は物理しか知らない私には新鮮な経験であった。補佐会では法人化を数年後に控えた大学改革の議論が始まっていて、時代の変化を強く感じる機会となった。柏新キャンパス構想は新しい大学への変革の目玉というべき存在で、新領域創成科学研究科の新設と物性研、宇宙線研の移転が新キャンパス構想の核であった。物性研の第一陣が柏で活動を開始したのが 1999 年 4 月で、翌年 4 月に柏移転が完了した。物性研の大学院教育は、従来からの物理専攻、化学専攻、物理工学専攻に加え、新領域創成科学研究科の物質系専攻における協力講座という新しいチャンネルが出来た。

柏での研究室では、二代目の助手・助教として 2001 年に藤井達也氏が着任した。ポスドクとしては、Stephanie Curnoe 氏がカナダからやってきて比較的短い期間ではあったが柏で研究に携わった。中国から来た Jize Zhao さんは最初物性研のポスドクとして、その後学振のポスドクとして研究室に滞在した。ポスドクの最後は柳有起氏である。この間チュービンゲン大学の Thomas Dahm 氏は物性研の外国人客員研究員制度を利用して 2007 年に半年間研究室に滞在して共同研究をした。

1999 年 3 月に物性研を定年退職された安岡元所長はその後日本原子力研究所の先端基礎研究センター長を勤められたが、先端基礎研の研究活動の活性化の方策の一つとしてアクチノイド化合物などの f 電子系を念頭に多体電子系理論グループを発足させることを立案し、私は客員としてグループリーダーを務めることになった。堀田貴嗣氏にサブリーダーをお願いし、瀧本哲也、眞榮平孝裕両氏をメンバーとしてこのグループは発足した。丁度そのころ 115 と呼ばれる f 電子

系の超伝導が発見された。我々のとった研究方針は、まず相対論的バンド構造計算を実行し、その電子状態を用いて、スピンあるいは軌道の揺らぎなどの多体効果による超伝導をミクロな立場から解明することであった。具体的には115系を対象に 2 重縮退したバンドモデルを構築し、それに対して FLEX 近似を実行した。こうした研究はその後の鉄系の理論研究では多くの研究者が採用し一般的な手法となったが、この時点では先駆的な研究であった。この理論グループの活動が本格化しようとする矢先に、私が物性研究所長に選ばれてしまいこのグループのリーダーを退任した。

所長時代の出来事については、別の機会に譲ることにして、ここでは在任中に起きた主な事項をリストアップするに留める。2004 年には国立大学が法人化された。各大学が個別に法人化される中で、全国共同利用とは何かという事が議論となった。法人化の影響のもう一つの結果として、物性研が柏移転の旗印としていた高輝度光源計画を断念せざるを得ない事態となった。2005 年には国際外部評価を実施した。それを受けて、新しい実験施設としてフライホイール電源を用いた長時間パルス強磁場計画、Spring-8 における東大アウトステーション計画等が発足した。2007 年には物性研創立50周年記念式典を旧物性研跡地にある政策研究大学院大学で挙行した。

所長を退任した 2008 年の 8 月には新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」の応募申請書類を提出した。この申請は、10 月のヒアリングを経て採択されるところとなり、11 月からそのプロジェクトがスタートすることになった。事務責任者の堀田貴嗣氏をはじめとする総括班の方々には計画の立案とその後の研究遂行に活躍していただいた。また多くの研究者が公募研究として参加してくださった。この新学術領域研究は 2012 年度末まで 5 年間のプロジェクトであったが、2013年には研究の取りまとめにあたった。研究成果の多くは2013年の夏に本郷キャンパルの伊藤国際ホールで開催された強相関電子系国際会議(SCES2013)で発表された。私は組織委員長を務めたが、榊原俊郎氏には事務局長として、国際会議の運営にあたって戴いた。

この 3 月末での定年退職後、安藤先生の後を受けて物理学会が刊行する英文学術誌 Journal of the Physical Society of Japan の専任編集長の役を仰せつかっている。少しづつ業務に慣れてきたところだが、改めてそのむつかしさを痛感する日々である。学術誌は研究成果のオープンアクセス化への対応を迫られている。JPSJ にはオープンセレクトという制度があるので、それをもとにオープンアクセス化への対応は可能であると思われる。最近の心配は JPSJ への投稿がこの 2，3 年減少していることである。これが一時的現象か否か、よく見極める必要があるが、物性コミュニティの方々の積極的な投稿をお願いしたい。

研究室の学生の人達との仕事についてはあまり触れる余裕がなかった。この 21 年間に研究室に所属した学生は 19 名である。個性ある学生たちがそれぞれ研究をして巣立っていったが、この間の経緯を振り返ると物性研における大学院教育のシステムについて再検討するべき時期に来ているように感じる。現役の所員の皆さんにはぜひ新しい制度設計を考えていただきたい。

21 年間の物性研在籍中、同僚の研究者、技術職員、事務職員、学生、秘書の方をはじめとする非常勤職員の方々等すべての物性研構成員、そして全国の物性コミュニティの方々にご支援をいただいた。改めてお礼を申し上げて筆をおくことにする。

外国人客員所員を経験して

ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE LAUSANNE
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY

INSTITUTE OF CONDENSED MATTER PHYSICS (ICMP)
Laboratory for Quantum Magnetism (LQM)
Station 3
CH - 1015 LAUSANNE
(021/693'03'29 Téléfax: 021/693'46'66
Site web : http://lqm.epfl.ch/

ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Report from Visiting Professorship at ISSP

I, Henrik M. Ronnow, spent the period 1st of December 2014 to 31st of March 2015 as visiting professor at the Institute for Solid State Physics (ISSP) at the Kashiwa campus of The University of Tokyo. I was kindly hosted by Professor Takatsugu Masuda in the Neutron Science Laboratory.

For me, this was an outstanding opportunity to interact with some of the many leading groups in neutron scattering, low-temperature techniques, materials discovery and theory that inhabit the ISSP.

Specifically, being hosted in the group of Prof. Masuda was very inspiring and fruitful. As just one example of their accommodating hospitality, during my stay they conducted their group meetings in English. As each group member presented progress on their topic, I could get an insight in the many exciting projects in the group, and in many cases I could provide useful suggestions based on my own experiences. I also got the impression that this was a very welcome opportunity for the group members to practice presentation skills in English, which inevitably is the universal international language of scientific dissemination.

During my stay we were able to perform several neutron scattering experiments at J-PARC both at the HRC and AMATERAS beamlines. I was very impressed by the performance of these beamlines, which demonstrated that Japanese neutron instrumentation is world class. Moreover, the continuous assistance from beamline responsibles and from both scientific and technical staff at the Neutron Science Laboratory was extraordinarily impressive.

My positive interactions were far from limited to the Neutron Science Laboratory. I enjoyed inspiring discussions about new materials exploration with Prof. Zenji Hiroi and his group members. Dr. Yosuke Matsumoto from the group of Prof. Satoru Nakatsuji very kindly performed ultra-low temperature specific heat measurements on $LiYbF_4$. And we were able to perform high field torque measurements in the laboratory of Prof. Toshiro Sakakibara. These positive experiences stretched beyond science with the ability to follow Japanese classes and several memorable dinners where I could enjoy the admirable friendliness and hospitality of my Japanese colleagues.

In summary, the visit to ISSP was a great success, for which I am extremely grateful. I believe this was the start of longer lasting collaborations, several of which are already ongoing. For instance, later this year will I have the pleasure to welcome and host in my Laboratory for Quantum Magnetism in Lausanne Prof. Masuda's student Shohei Hayashida for an exchange visit forming part of his PhD.

I sincerely thank the ISSP for this splendid opportunity - Arigatou gozaimasu,

Prof. Henrik M. Ronnow

客員所員を経験して

東北大学多元物質科学研究所　　佐藤 卓

2014 年度後期に吉澤英樹先生のホストで附属中性子科学研究施設の客員教授としてお世話になりました。私事で恐縮ですが、2012 年 3 月まで物性研中性子所員として所属していたため、客員所員として再度物性研にお世話になるのは時期尚早かとも考えました。しかしながら、物性研転出に際して幾つかの仕事をやり残していた事もあり、これらの研究を終わらせることができればと思い、客員所員に応募させて頂いた次第です。

このような研究の 1 つは梯子型鉄系化合物 AFe_2X_3 (A = Ba, Cs; X = Se, S) の物性研究です。この研究は物性研に残した大学院生羽合孝文君の博士論文テーマであり、吉澤研究室、大串研究室(現東北大)、上床研究室の 3 つの研究グループにお世話になりながら研究を進めて参りました。鉄系超伝導体は一般に鉄の 2 次元正方格子を構造的特徴としていますが、AFe_2X_3 では鉄原子が梯子型構造(準 1 次元構造)を形成することに特徴があります。一方で殆どの鉄系超伝導体母物質が金属である事に対して、この系は絶縁体です。この梯子形鉄系化合物を金属化できるだろうか、さらには超伝導化できるだろうかという素朴な疑問が研究の発端です。我々は中性子散乱法を用いてこの物質群の磁気構造や磁気励起を測定する事でこの系の磁性を詳細に調べる事を分担しました。なかでも、キャリアドーピングに関しては (Ba, Cs)Fe_2Se_3 の磁気構造のドーピング依存性を詳細に調べる事により、金属化には至らなかったもののドーピングにより反強磁性相が強く抑えられる事を示しました[1]。さらに、$BaFe_2Se_3$ 単結晶の中性子非弾性散乱からは強い 1 次元的な磁気励起が観測されましたが、この励起は単純な局在スピン系のスピン波励起では説明出来ない可能性がありそうです[2]。これらの実験は客員所員期間に限らずそれ以前およびそれ以降の長いスパンで、米国オークリッジ国立研究所の HFIR および SNS 中性子施設を用いて継続的に行っておりますが、このような実験が可能になのも物性研が実施している日米協力事業のおかげです。また、高橋先生(日大)、大串先生を中心に高圧物性が測定され、$BaFe_2S_3$ において高圧下での金属化および超伝導転移が観測されたことはこの系の更なる可能性を示唆しています[3]。

もう 1 つの研究は、物性研と高エネルギー加速器研究機構(KEK)が共同で J-PARC に建設した高エネルギー分解能チョッパー型分光器 HRC を用いた eV 領域の中性子分光の可能性の追求です。これまで中性子散乱は比較的低エネルギー領域(meV 領域)の分光が中心でしたが、J-PARC に代表される大強度核破砕中性子源では eV 領域の中性子が十分な強度で得られるようになりました。そこで、このようなエネルギー領域での中性子分光にチャレンジすべく建設されたのが HRC です。電子系に限って言えば、meV 領域ではスピン励起(例えばスピン波等)が中性子非弾性散乱の観測対称になりますが、eV 領域ではスピン反転を伴う電子励起を観測出来る可能性があります。通常の半導体ではギャップが大きくスピン偏極もないため、その観測は難しいと思われます。そこで、客員所員期間の目標としては sub eV 程度でスピン分裂していると考えられているバルクラシュバスピン分裂系の実験を提案致しました。残念ながら 2014 年後期の J-PARC の運転が 2015 年 1 月のミュオン施設火災によって中断するなどの原因で、いまだ最終的な実験には至っておらず大変残念なところですが、是非中性子によるスピン反転電子励起の観測を成功させたく現在も準備を進めております。

半年と言う短い期間で、さらに諸般の事情により計画した実験がなかなか行えないという現実もあり、結局すべての仕事を終える事は出来ませんでした。しかしながら、梯子形鉄系化合物に関してはかなり研究を進める事が出来ましたし、高エネルギー中性子分光に関しても今後に向けて着実に前進することが出来ました。吉澤先生、上床先生、大串先生(現東北大)をはじめとする物性研の皆様、さらには HRC 利用を通じて伊藤晋一先生(KEK)をはじめとする HRC グループの皆様には大変お世話になりました。深く感謝申し上げますとともに、今後も中性子散乱に微力ながら努力する所存ですのでどうぞよろしくお願い申し上げます。

[1] Takafumi Hawai, Yusuke Nambu, Kenya Ohgushi, Fei Du, Yasuyuki Hirata, Maxim Avdeev, Yoshiya Uwatoko,Yurina Sekine, Hiroshi Fukazawa, Jie Ma, Songxue Chi, Yutaka Ueda, Hideki Yoshizawa, and Taku J. Sato, Phys. Rev. B, 91, 184416/1–11(2015).

[2] T. Hawai *et al.* (in preparation).

[3] Hiroki Takahashi, Akira Sugimoto, Yusuke Nambu, Touru Yamauchi, Yasuyuki Hirata, Takateru Kawakami, Maxim Avdeev, Kazuyuki Matsubayashi, Fei Du, Chizuru Kawashima,Hideto Soeda, Satoshi Nakano, Yoshiya Uwatoko, Yutaka Ueda, Taku J. Sato, and Kenya Ohgushi, Nature Mater. 14, 1008–1012 (2015).

物性研滞在型国際ワークショップ・シンポジウム

滞在型国際ワークショップ・シンポジウム"New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (NPSMP2015)"が2015年6月1日〜19日の3週間の期間で開催された。運営資金は物性研究所(所長裁量経費・短期研究会経費)と新学術領域「ナノスピン変換科学」のほか、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)、元素戦略磁性材料研究拠点(ESICMM)及び東工大元素戦略拠点(TIES)からの援助に基づいている。ワークショップでの講義(1 時間講演)の数は談話会を含めて全部で15、ワークショップとシンポジウムを併せて30分講演数は49、シンポジウムでのポスター発表数は53(過去最多)であった。ワークショップ全期間にわたる全参加者(招待講演者含む)は229名で、そのうち外国人は54名であった。国内外の遠くからの参加者と共に、物性研究所の所員・学生が多数出席し、討論にも活発に参加していた。

本ワークショップ・シンポジウムでは、近年進展の著しい「スピントロニクス分野」と「メゾスコピック分野」の2分野を取り上げ、世界の最前線で活躍している海外の理論研究者を招待して滞在していただき、国内の研究者と十分な時間をかけて議論を行うことを目的とした。特に、分野間の交流を通して、将来重要となる研究テーマについて討議し、今後の展望を探ることを意図した。ワークショップの第2週の3日間(6月10日〜12日)に行われた国際シンポジウムでは、実験家も交えて、最新の研究成果について報告・討議が行われた。

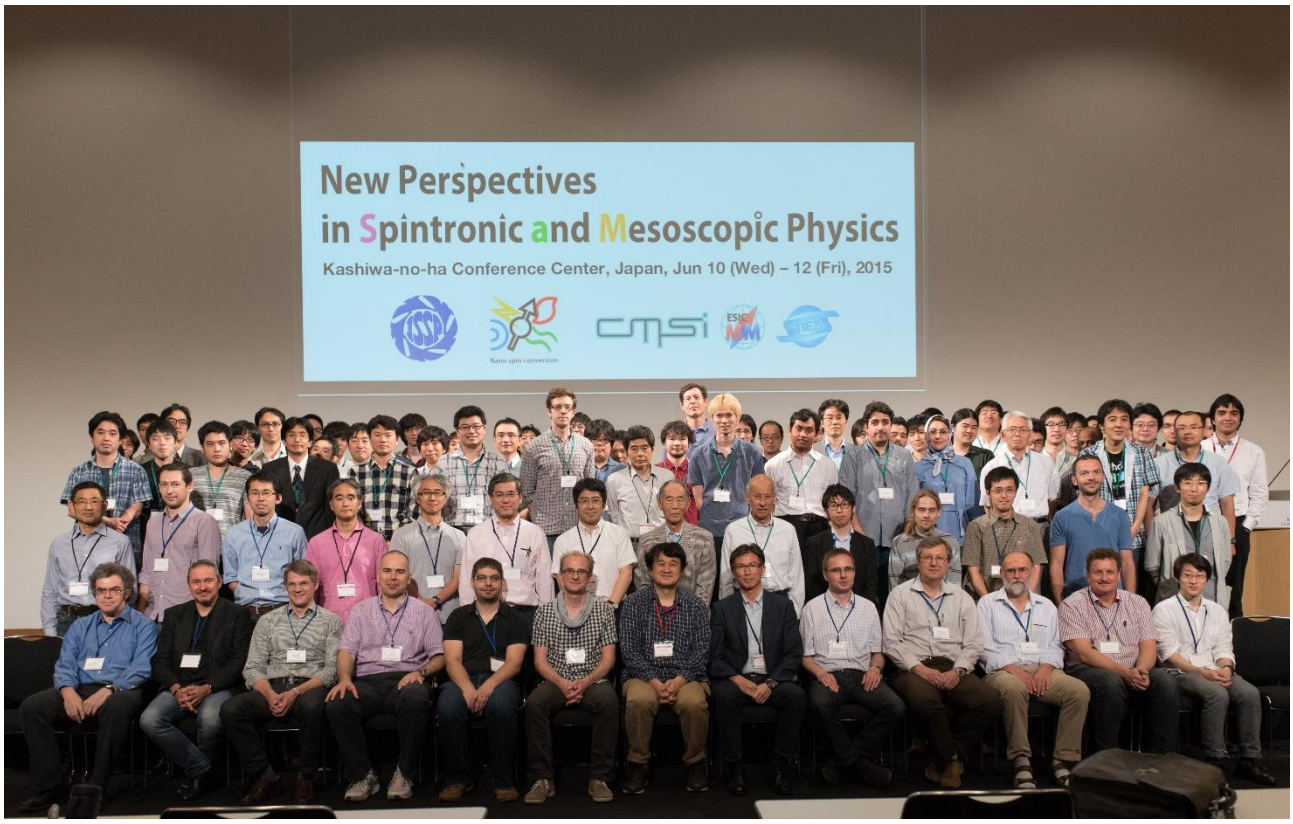
ワークショップ期間中は、午前中に海外の招待講演者による1時間の講義を行い、午後には主に若手研究者による最近の研究報告(30分講演)を1〜2件行うというフォーマットを原則とし、自由討論の機会と時間を多く確保するように努力した。海外招待講演者による講義の内容はバラエティに富んでおり、異なる分野との交流を意図した優れたイントロダクションを含む講演が多かった。まずスピントロニクス分野では、Alexey Kovalev 氏、Igor Zutic 氏、Yaroslav Tserkovnyak 氏らがスピン軌道相互作用を利用した新奇スピン輸送の有効理論について、Hubert Ebert 氏、Evgeny Y. Tsymbal 氏が第一原理計算の立場からスピン応答理論や強誘電接合などの研究成果について、それぞれ紹介を行った。メゾスコピック分野では、Gergely Zaránd 氏、Volker Meden 氏が非平衡統計力学の基礎に関する最近の研究成果を紹介し、Wolfgang Belzig 氏、Thierry Martin 氏、Reinhold Egger 氏は強磁性・超伝導接合、電子の二粒子干渉、半導体におけるマヨラナ粒子について、それぞれ研究成果の報告を行った。境界領域では、Roland M. Wiesendanger 氏が表面を使ったスピントロニクス研究について、Allan H. MacDonald 氏が量子スピンホール効果の基礎と応用について、それぞれレビュー講演を行った。また Leonid Levitov 氏はグラフェンの超格子構造を使ったスピンホール効果についての研究成果を紹介した。講演後、多くの参加者がティールームなどの議論スペースで講演者と十分な時間を使って討議を行う様子が見られ、滞在型ワークショップのメリットである「ゆったりとした余裕のある雰囲気のもとでの議論」が行われたものと考える。シンポジウム前日の 6 月 9 日には、本ワークショップとリンクする形で、物性研ミニワークショップ"Spins at Surfaces"が開催された。また、6 月 17 日には Allan H. MacDonald 氏が物性研談話会にて "Exciton Condensates are Super!"と題してエキシトン凝縮に関する講演を行い、大変盛況であった。

6 月 10 日〜12 日の 3 日間はシンポジウム期間とし、国内外から多数の研究者が最新の研究成果について講演やポスター発表を行った。実験的研究が進められているテーマについては、中心的な役割を果たしている実験家も招待して講演して頂いた。その内容は多岐にわたるが、特に集中して議論されたテーマとしては、トポロジカル絶縁体を使ったスピン輸送、スピンホール効果、量子スピンホール効果、ナノ素子における量子情報制御、原子層物質の輸送特性、バレートロニクス、近藤効果、散逸とデコヒーレンス、ショットノイズ(電流ノイズ・電流相関)、スカーミオン、表面スピン構造などを挙げることができる。海外招待講演者の Björn Trauzettel 氏はシンポジウム講演のみの参加となったが、スピンホール効果と超伝導のハイブリッド系についての自身の研究が紹介された。シンポジウム期間は、通常のワークショップ期間に増して多くの参加者があり、3 日間の延べ参加者数は 320 名に達した(ワークショップ期間 12 日間の延べ参加者数は329 人)。これは、2つの分野の交流をテーマとしたために参加者層が拡大したことに加え、2分野とも物性物理のテーマとしても確立したものであり、国内でも若手研究者が多く育ってきていることによるものと考えられる。

今回の国際ワークショップ・シンポジウムでは、なるべく若手の研究者に講演の機会を与えるように配慮したが、国内の若手・中堅研究者の研究水準の高さを示す機会にもなった。実際、レベルの高い若手研究者の発表では、海外招待講演者のレベルに匹敵するものも複数見受けられた。シンポジウムでのポスター発表の件数は過去最多であり、その内容のレベルも高く、ここでも若手研究者を中心とした研究のアクティビティの高さが示されたと考える。

最後に、このワークショップ・シンポジウムを実施するにあたり、関係研究室の秘書の皆様、CMSI 事務局の皆様、物性研国際交流室の皆様、事務部、特に、共同利用係・総務係・経理係の皆様のご協力に感謝します。また、瀧川仁所長、組織委員会の委員(前川禎通氏、バウアー・ゲリット氏、多々良源氏、都倉康弘氏、江藤幹雄氏、勝本信吾氏、小林研介氏)、助教の阪野塁さん・木俣基さん、そのほか所内外で参加協力頂いた多くの方々に感謝します。

NPSMP2015 組織委員(Chair) 加藤岳生（物性理論研究部門）
NPSMP2015 組織委員(Chair) 大谷義近（ナノスケール物性研究部門）



物性研究所短期研究会

『機能物性融合科学研究会シリーズ(3)「反応と輸送」』の報告

日時：2015 年 6 月 24 日(水)～2015 年 6 月 26 日(金)
場所：物性研究所本館６階 大講義室(A632)

研究会提案代表者：吉信 淳（物性研）
共同提案者：金光 義彦（京大化研）、腰原 伸也（東工大）、常行 真司（東大理）、中村 潤児（筑波大）、福谷 克之（東大生産研）、松本 吉泰（京大理）、小森 文夫、柴山 充弘、末元 徹、森 初果、山室 修、秋山 英文、杉野 修、野口 博司、原田 慈久、松田 巌、リップマー・ミック（以上、物性研）

物性から「機能」を引き出し利用できるようにするためには、物質の基底状態・平衡状態の静的電子物性を基盤として、励起状態・非平衡状態、さらには化学反応や生体系に至る動的な性質に踏み込む必要がある。「機能物性」では、伝統的な物性物理が対象としてきた電子・スピン・格子と、それらの動的過程だけでなく、原子・イオンの移動や原子の組み替え(反応)を含めて、マルチスケール・階層的複合構造をもつ物質システムを扱う必要がある。これらを俯瞰する基礎学理を構築するためには、物理・化学・生物・計算科学・工学など既存の学問分野に留まることなく、融合科学・学際科学を構築することが必要であろう。

機能物性融合科学研究会シリーズの 3 回目となる本短期研究会では、次のような観点から、研究者や大学院生が、依頼講演(29 件)とポスター発表(40 件)を行った。

(1)不均一系(表面、界面)における反応と輸送(触媒、光触媒、結晶成長など)
(2)固体内および界面における電荷ダイナミクス(電子正孔対の生成と分離、輸送・移動など)
(3)原子やイオンの輸送(水素吸収脱離、プロトン伝導、電気化学など)
(4)分子系における反応と輸送(単分子、生体分子など)

参加者数は、初日 76 名(学内 51 名、学外 25 名)、二日目 85 名(学内 56 名、学外 29 名)、三日目 50 名(学内 32 名、学外 18 名)であった。三日目の最後に、3 回の研究会シリーズ全体を貫く「機能物性」と物性研の将来計画について活発に意見交換が行われた。

初日のセッション 1 では表面界面における反応と輸送について講演があった。松本氏は、光触媒としての金属酸化物表面における電荷トラップと反応について概観した後、超高速表面分光による結果を発表した。高村氏は、近年注目を集めている新しい二次元物質の一つであるシリセンの ZrB_2/Si(111)表面における成長について報告した。八田氏は、自ら開発した温度可変型 4 端子プローブによる半導体表面の低次元金属の電気伝導について報告した。セッション 2 は、単分子物性や分子膜を応用したデバイスに関連した講演である。夛田氏は表面やブレークジャンクションで形成された単一分子結合系のキャリヤ輸送について、スピントロニクスや熱電素子などへの応用について概観した。木口氏は、単分子接合を使ったダイオードやスイッチについて具体例を示した。平野氏は、半導体微細加工技術を利用して脂質二重膜を含むチップを作製し、さらに脂質二重膜に機能性タンパク質分子を包埋させた。このデバイスを用いてイオンチャネル電流の測定を行い、阻害剤などの効果が検証できること示した。米田氏は、単一分子デバイスを目指してダブルデッカー型分子のスピン制御について STM による研究を発表した。二日目の朝、竹谷氏は有機半導体単結晶デバイスにおけるドーピングメカニズムと伝導について光電子分光による結果を含めて議論を行った。

二日目午前は、凝縮系にけるダイナミクスについて発表と議論が行われた。腰原氏は、最新の放射光やレーザーを用いて、隠れた状態を光励起で見つけ出すという切り口で凝縮系での光エネルギー変換過程について講演した。金光氏は、太陽電池におけるキャリアの生成、分離、輸送において、動作中のキャリア挙動の観察が重要であると報告した。赤木氏は、第一原理計算にもとづいた計算物理の立場から、固液界面の構造とダイナミクスについて講演した。倉橋氏は、スピン・

回転状態を選別した酸素分子線を用いて、Si、Al、Ni 表面における解離吸着ダイナミクスの詳細を明らかにした。

二日目の午後前半は水素の関係する物性と材料について討論を行った。福谷氏は、酸化物および Pd における水素原子の輸送と電子状態について報告した。水素の荷電状態と運動性が鍵を握ることが強調された。折茂氏は、錯体水酸化物での Li イオンの伝導現象について報告した。その機構解明は電池応用につながる。樋口氏は放射光 X 線構造解析によるタンパク質の構造解析、特にヒドロゲナーゼの反応機構とプロトン移動について、構造生物学の立場から講演した。重田氏は、第一原理計算に基づいて、チトクロム c 酸化酵素の機能解明について報告した。上田氏は、水素結合ユニットを有する有機伝導体を合成し、水素結合により物性や機能発現が大きく変化することを報告した。

二日目午後のセッション 5 のテーマは不均一触媒である。中村氏は、表面科学の成果を如何に触媒設計に活かすかという観点から、二酸化炭素からのメタノール合成反応や、グラファイトに坦持した Pt クラスターを例に講演した。森川氏は、第一原理計算に基づいた不均一触媒反応や、液体 Ga における GaN 成長機構などを例に原子論的立場から表面反応と結晶成長について発表した。朝倉氏は、可視光応答型半導体光触媒における励起ダイナミクスを放射光および X 線自由電子レーザーを用いて観測した。先駆的実験であるが、理論的な解釈が難しくこの分野の更なる発展が不可欠である。山本氏は、ポンププローブ型時間分解放射光軟 X 線光電子分光を用いたキャリアダイナミクス観測について報告した。光触媒反応は励起、キャリア移動、反応など数ステップを経由して起こるプロセスであり、時間および空間分解したダイナミクス観測が重要である。

三日目午前のセッション 6 は電気化学とイオン輸送についてである。魚崎氏は、電気化学の基礎とエネルギー変換に関してチュートリアル講演を行った。これは、このあとの講演を理解するための基礎となった。星氏は、遷移金属ステップ表面を試料として酸素還元反応触媒の高活性化に向けた系統的研究を発表した。尾形氏は大規模な第一原理的シミュレーションにより、固液界面や有機無機界面における原子・分子・イオン種の動的挙動について報告した。杉野氏は、「機能物性」の概念について理論的な立場からレビューを行い、さらに計算による高精度反応シミュレーションの課題について議論した。

三日目午後前半は、材料と生体分子に関するセッションである。塚田氏は、機能物性が物質科学と材料科学のクロスオーバ領域に位置することを示し、理論と実験によるコラボレーションにより材料についてミクロな理解が進むことを示した。大胡氏は、ヘムタンパクの構造と機能について、X 線精密構造解析とそれに基づく電子状態解析の詳細を報告した。大場氏は、大規模第一原理計算による半導体ヘテロ界面のバンドアラインメントや格子欠陥による特性を予測し、物質開発への展開について講演した。リップマー氏は、半導体光触媒において重要な酸化物表面と水との相互作用について、局所プローブ顕微鏡による結果に基づき議論した。

初日と二日目の夕刻に行われたポスターセッションでは、若手研究者や大学院生を中心に最新の成果が報告された。各ポスターの前で、発表者との熱い議論や意見交換が行われた。

三日目午後後半は、物性研の「機能物性」構想について森所員が紹介した後、過去に行われた機能物性研究会シリーズについて簡単な報告があった。それらを受けて、出席者間で活発な意見交換を行った。多くの意見や、物性研に対する要望があり、たいへん有意義であった。物性研が目指す「機能物性」研究においては、単に応用を主眼とした研究ではなく機能を引き出すための基盤的研究をしっかり行うこと、物性研内部だけではなく外部との連携にも配慮して進めることが重要である、とまとめることができる。

最後に、本短期研究会の準備と運営において、物性研事務の方々、各研究室のスタッフや学生諸君にご協力をいただいた。この場を借りて感謝したい。なお、本短期研究会の詳細(要旨集のダウンロードを含む)は、下記の URL を参照していただきたい。

http://yoshinobu.issp.u-tokyo.ac.jp/2015ReactionTransport.html

平成２７年度前期物性研究所短期研究会
機能物性融合科学シリーズ（3）
「反応と輸送」
提案説明
2015.06.25 18:31

発表風景と集合写真

プログラム（敬称略）

2015/6/24（水曜日）

13:00-13:15　はじめに（所長、提案代表者）

セッション１：表面界面における反応と輸送（座長：松田 巌）

O-1　13:15-14:00　松本 吉泰（京大院）「金属酸化物表面における電荷トラップと反応」

O-2　14:00-14:30　高村(山田)由起子（北陸先端大）「エピタキシャル二次元材料の形成における反応と輸送」

O-3　14:30-15:00　八田 振一郎（京大院）「温度可変型 4 端子プローブでみる表面低次元金属の電気伝導」

＜休憩＞

セッション２：単分子物性／分子素子（座長：小森 文夫）

O-4　15:15-16:00　夛田 博一（阪大院）「単一分子接合のキャリア輸送機構」

O-5　16:00-16:30　木口 学（東工大院）「単分子接合におけるダイオード、スイッチング特性」

O-6　16:30-17:00　平野 愛弓（東北大院）「半導体微細加工で創る脂質二分子膜イオンチャネルチップ」

O-7　17:00-17:30　米田 忠弘（東北大多元研）「単分子・分子デバイスに向けた反応を用いた電荷輸送制御」

ポスターセッション（物性研本館 6F ラウンジ）

17:30-18:30　ポスターセッション発表者（奇数番号＋P-34, P-40）

2015/6/25（木曜日）

O-8　9:00-9:30　竹谷 純一（東大院新領域）「有機半導体におけるドーピングメカニズムとキャリア伝導」

（座長：松本吉泰）

セッション３　凝縮系ダイナミクス（座長：松本 吉泰）

O-9　9:30-10:15　腰原 伸也（東工大院）「電荷分離反応と電荷輸送のナノ機構　-新観測技術で何が覗けるか？-」

O-10　10:15-10:45　金光 義彦（京大化研）「太陽電池におけるキャリア生成、分離、輸送」

O-11　10:45-11:15　赤木 和人（東北大 AIMR）「固液界面の構造とダイナミクスへの計算科学からのアプローチ」

O-12　11:15-11:45　倉橋 光紀（NIMS）「量子状態選別酸素分子ビームによる表面反応スピン・立体効果の解析」

＜昼食＞

セッション４　水素の関係する物性と材料（座長：常行 真司）

O-13　13:00-13:45　福谷 克之（東大生産研）「水素の輸送と電子状態」

O-14　13:45-14:15　折茂 慎一（東北大 AIMR/金研）「錯体水素化物での高速イオン伝導現象－その機構解明と電池応用」

O-15　14:15-14:45　樋口 芳樹（兵庫県立大）「ヒドロゲナーゼの水素活性化反応機構とプロトン移動」

O-16　14:45-15:15　重田 育照（筑波大院）「第一原理計算に基づく酵素機能解析：チトクロム c 酸化酵素のプロトンポンプを例として」

O-17　15:15-15:45　上田 顕（東大物性研）「水素結合を活用した特異な純有機伝導体の開発と物性・機能開拓」

＜休憩＞

セッション５　不均一触媒（座長：福谷 克之）

O-18　16:00-16:45　中村 潤児（筑波大院）「環境エネルギー分野の触媒開発と学理」

O-19　16:45-17:15　森川 良忠（阪大院）「第一原理シミュレーションによる不均一触媒の研究」

O-20　17:15-17:45　朝倉 清高（北大触媒センター）「可視光応答型水分解 WO_3 触媒における励起構造の Pump-Probe XAFS 観察」

O-21　17:45-18:15　山本 達（東大物性研）「酸化物半導体のエネルギー変換過程におけるキャリア輸送ダイナミクスのリアルタイム観測」

ポスターセッション　および交流会（物性研本館６F ラウンジ）

18:30-19:30　ポスターセッション発表者（偶数番号）

19:00-20:00　交流会

2015/6/26（金曜日）

セッション６　電気化学とイオン輸送（座長：中村 潤児）

O-22　9:30-10:15　魚崎 浩平（NIMS）「電気化学の基礎とエネルギー変換」

O-23　10:15-10:45　星永 宏（千葉大院）「電極表面構造の規整による酸素還元反応の高活性化」

O-24　10:45-11:15　尾形 修司（名古屋工大）「固液界面、有機無機界面に関する第一原理的な大規模シミュレーション」

O-25　11:15-11:45　杉野 修（東大物性研）「次世代高精度化学反応系シミュレーション構築への課題と展望」

＜昼食＞

セッション７　材料と生体分子の科学（座長：杉野 修）

O-26　13:00-13:45　塚田 捷（東北大 AIMR）「物質科学と材料研究」

O-27　13:45-14:15　大胡 惠樹（帝京大医）「ヘムモデルの構造と電子状態」

O-28　14:15-14:45　大場 史康（東工大応セラ研）「半導体における格子欠陥特性の理論予測の高精度化と物質探索への展開」

O-29　14:45-15:15　Mikk Lippmaa（東大物性研）"The structure of water on oxide surfaces"

＜休憩＞

セッション８　物性科学新分野（機能物性）と物性研将来計画（座長：吉信 淳）

15:20-15:35　森 初果（東大物性研）：新センター構想「機能物性」

15:35-15:40　森 初果（東大物性研）：機能物性「光機能」研究会の報告

15:40-15:45　山室 修（東大物性研）：機能物性「ソフトダイナミクス」研究会の報告

15:45-16:30　討論

ポスター発表：

2015/6/24（水曜日）（奇数番号＋P-34, P-40）

P-1	川崎 聖治（東大・物性研）	金属ナノピラーを利用した光電気化学特性の高効率化
P-3	岡 真悠子（東大・理）	エピタキシャル歪み下における ZrO_2 系薄膜の構造変化とイオン伝導性に関する第一原理計算
P-5	深澤 守（東大・物性研）	有機薄膜のための非破壊液体金属４探針電気伝導測定装置の開発
P-7	山本 良幸（東大・理）	拡散量子モンテカルロ法によるルチル型 SiO_2 中水素原子の最安定状態の解析
P-9	吉田 順哉（東大・物性研）	水素結合を媒介とした動的分子配列変化を起こす有機伝導体の対アニオン依存性

P-11	中前 秀一（東大・物性研）	量子井戸キャリア密度の空間的な揺らぎの定量測定
P-13	岩田 孝太（大阪大・工）	Si(111)表面上単一有機分子の室温原子間力顕微鏡測定
P-15	畠山 遼子（東大・総合文化）	微小な量子熱統計力学的機械のプロトタイプ
P-17	佐藤 暢哉（東大・理）	2 次元的電子状態をもつペロブスカイト型酸水素化物 KTiO2H の理論予測
P-19	山本 駿玄（東大・物性研）	Ag(111)表面における物理吸着酸素の構造と電子状態
P-21	宮田 佳典（東大・物性研）	走査トンネル顕微鏡による Pb/Ge(111)系の近接効果に関する研究
P-23	KIM HOWON（東大・物性研）	Site-specific atomic-scale Josephson coupling studied by a scanning tunneling microscopy
P-25	土師 将裕（東大・物性研）	スピン偏極 STM を用いた W(110)上の 2 層 Mn 薄膜の磁気構造と電子状態の観察
P-27	浜田 雅之（東大・物性研）	走査トンネルポテンショメトリー法の開発
P-29	染谷 隆史（東大・物性研）	フェムト秒域時間分解光電子分光法と三温度モデル解析による SiC(000-1)面成長グラフェンの電子格子相互作用の研究
P-31	加藤 史明（京大・理）	Pt(111)上の結晶氷薄膜における H/D 交換反応の膜厚依存性
P-33	木内 久雄（東大・工）	X 線光電子・吸収分光による窒素ドープグラファイトに化学吸着した CO_2 の観測
P-34	向井 孝三（東大・物性研）	HREELS によるシリセン/ZrB_2/Si(111)のフォノン分散とシリセンの構造
P-35	吉田 靖雄（東大・物性研）	積層欠陥が Co ナノアイランドの磁気異方性と電子状態に及ぼす影響
P-37	山本 航平（東大・物性研）	共鳴軟 X 線散乱でみた $La_{1/3}Sr_{2/3}FeO_3$ の磁気秩序の膜厚依存性
P-39	正能 大起（東大・物性研）	Fe_3O_4 薄膜の dewetting の In-situ 観察
P-40	野口 秀典（物質・材料研究機構）	電気化学和周波発生分光法を用いた電極/溶液界面電子構造のプローブ

2015/6/25（木曜日）（偶数番号）

P-2	高橋 竜太（東大・物性研）	$Ag_6O_8AgNO_3$ 結晶の光電気化学エピタキシー合成
P-4	樋山 みやび（東大・物性研）	オキシルシフェリン光ルミネッセンスにおける発光反応経路と振動構造
P-6	杉本 宜昭（東大・新領域）	室温で動作する原子スイッチの組立
P-8	吉本 真也（東大・物性研）	F4-TCNQ 分子吸着エチレン終端 Si(100)表面の電子状態と電気伝導度
P-10	塩足 亮隼（東大・新領域）	Cu 表面上における水分子による NO 還元反応の STM 観測
P-12	古府 麻衣子（東大・物性研）	パラジウムおよびそのナノ粒子中の水素の拡散ダイナミクス
P-14	丸山 伸伍（東北大・工）	イオン液体超薄膜の作製とその伝導度
P-16	辺見 茂（ペタマグネティックソフトウェア）	異種金属及び電界液を解析対象としたガルバニック腐食電流有限要素法
P-18	東野 寿樹（東大・物性研）	非共有結合性相互作用を用いた大気安定有機トランジスタ
P-20	長塚 直樹（東大・生産研）	アナターゼ型 TiO_2(101)表面における欠陥誘起電子状態
P-22	吉田 正裕（東大・物性研）	EL 絶対値計測による多接合太陽電池の発光量子効率評価と性能診断
P-24	塩澤 佑一郎（東大・物性研）	亜鉛で修飾した Cu(111)表面におけるギ酸の吸着と解離
P-26	吉澤 香奈子（東大・物性研）	ルチル型酸化物半導体中の不純物水素の電子状態と余剰電子状態
P-28	丹羽 秀治（東大・物性研）	その場軟 X 線共鳴発光分光による酸素吸着前後の鉄フタロシアニンの電子状態解析
P-30	大谷 優介（物質・材料研究機構）	色素増感太陽電池における Ru/有機色素混合系の共増感効果
P-32	芳倉 佑樹（東大・物性研）	F4-TCNQ 分子のエチレン終端 Si(100)-(2×1)表面における吸着状態
P-36	植田 寛和（物質・材料研究機構）	極低温氷表面上での水素分子のオルソ・パラ転換における温度依存性
P-38	小板谷 貴典（東大・物性研）	雰囲気光電子分光法による Cu(997)表面における二酸化炭素の活性化および水素化のオペランド観測

物性研究所短期研究会

ガラス転移と周辺分野の科学

日時：2015 年 7 月 30 日(木)～2015 年 8 月 1 日(土)
場所：物性研究所本館６階 大講義室(A632)

研究会提案代表者：山室 修（物性研）
共同提案者：小田垣 孝（東電大理工）、田中 肇（東大生産研）、宮崎 州正（名大院理）、深尾 浩次（立命大理工）、野嵜 龍介（北大院理）、猿山 靖夫（京工繊大）、山室 憲子（東電大理工）

ガラス転移は大きな構造変化を伴わず液体が固化する不思議な現象であり、古くから多くの研究者がその謎に挑戦してきた。未だその機構は解明されていないが、近年、いくつかの興味深い結果が報告されている。実験研究では、気相から蒸着して得られる超安定分子ガラス、制約空間・薄膜でのガラス転移、中距離秩序構造をもつイオン液体のガラス転移などが注目されている。また、水和蛋白質の動力学転移、スピングラス転移、粉体のジャミング転移、液体-液体転移などの関連した現象も活発に研究されている。理論研究では、エネルギーランドスケープ理論を一般化したランダム一次転移理論、ガラス転移と粉体のジャミング転移の統一的理解に向けた試み、液体の局所安定構造に着目した計算機シミュレーション、動的不均一を様々な形で表現した計算機シミュレーションなどが盛んである。ガラス転移とともにガラス研究の大問題であるボゾンピークについても、近年、音響モードの分散曲線との関連などについて明瞭なデータが 得られてきている。さらには、無機ガラスや高分子ガラスをベースにした新規材料開発、生体や食品の冷凍保存技術など、応用を視野に入れた研究も活発に行われている。

以上の様な状況において、広い意味でガラスおよびガラス転移の基礎を研究している実験、理論、計算機シミュレーションの研究者が一同に会し、現状を確認し合うとともに、将来の研究の方向について議論することは非常に有意義である。物性研究所では、国内最大規模のガラス関係の研究集会として、これまで 2002 年、2004 年、2006 年、2010 年と同様の研究会を開催してきた。今回、4 年半ぶりに行う本研究会では、これまでの参加者以外にも、新しい世代、新しい分野の研究者を加え、より包括的かつ将来に向けた議論を行うことを目的とした。

本研究会の特徴の一つは、講演者を招待講演者で固めるのではなく、世話人が推薦した一部の講演者を除き、大部分の講演者を一般募集することである。最終的に、口頭発表 32 件、ポスター発表 41 件が集まった。実験と理論の比率はほぼ半々である。参加者数は、初日 95 名(学内 18 名、学外 77 名)、2 日目 95 名(学内 12 名、学外 83 名)、3 日目 73 名(学内 9 名、学外 64 名)であった。ガラス転移は物性研にとってはあまり馴染みのないテーマであるため、学内からの参加者が少ないことは覚悟していたが、学外からの参加者は予想以上であり、これまでのガラスの研究会で最大規模となった。ガラス分野の研究の活発さと本研究会への大きな期待が感じられた。

研究会初日は、所長挨拶と趣旨説明に引き続き、ガラス・液体の基本的な実験のセッションから始まった。分子ガラス(ファンデルワールスガラス)と酸化物ガラス(ネットワークガラス)の構造とエントロピーについての興味深い発表が行われた。中でも、低温蒸着法によって CO_2 が初めてガラスになり、その構造が結晶に近いものであるという結果はインパクトがあった。引き続き、液体・ガラスの理論・計算機シミュレーションの発表が行われた。これらの研究の共通したキーワードは液体の“局所構造”であり、それらはボンド配向秩序度、正四面体配位度、コンタクトイオンペアのネットワーク形成度(イオン液体の場合)などで表現される。これらがガラス転移、結晶化、そしてガラス形成液体の最も重要なパラメータといわれる“フラジリティ”に与える影響が示された。初日の最後は高分子系の実験の発表が行われた。高分子は最も一般的なガラス形成物質である。温度変調誘電率の非線形成分から得られる“緩和時間の緩和時間”は新しい概

念であり、非常に興味深かった。それ以外に、高分子薄膜の誘電測定と高分子混合系(高分子ブレンド)の中性子小角散乱の研究が発表された。

2 日目の最初のセッションでは、液体—液体相転移(液液転移)の研究が発表された。もちろん液液転移はガラス転移とは異なるが、ガラス転移と同様に対称性の変化を伴わない状態変化という点で注目されている。液液転移の代表は低温・高圧下で存在するとされる高密度水—低密度水の転移であるが、通常の冷却では水は結晶化するため、混合系、水を細孔内に閉じ込めた系の研究がよく行われる。本セッションでは、グリセロール水溶液のラマン散乱の研究、シリカ細孔内のヒドロキシルアミン水溶液の熱測定の研究が紹介された。また、新しい系として、シリカ細孔内のシクロヘキサンの研究が発表された。いずれも未だ結論は出ていないが、今後の展開が期待される結果であった。続いて、液体・過冷却液体の計算機シミュレーションの研究が紹介された。ここでは、自由エネルギーランドスケープ理論による液体の結晶化、液体輸送という観点からのガラス転移の空間相関、動的協働促進理論による剛体球系の圧縮ガラス化について議論された。午後の最初のセッションでは、液体・ガラスの誘電分光による研究が紹介された。誘電分光は mHz から THz まで十数桁の周波数範囲で測定できる最も広帯域の測定手法である。本セッションでは、水素結合性液体と有機液体の“ボゾンピーク”と呼ばれる THz 領域の振動励起に関する新しい結果が示された。また、様々な水溶液の誘電緩和の温度・周波数特性と前述の高密度水／低密度水を関連付ける試みが示された。2 日目の最後のセッションでは、ガラス転移とシアシックニングの理論についての発表が行われた。シアシックニングとは液体に強いせん断速度をかけたときに液体の粘性が増大する現象である。本セッションの最初の 2 つの講演では、粒子に働く慣性だけでなく粒子間摩擦を取り込むことにより、シックニングが急激に起こるメカニズムが明快に説明された。3 つ目の講演では、近年のガラス転移研究でよく用いられるレプリカ理論を、球形粒子液体からネットワーク性液体や剛体楕円体に拡張する試みが示された。理論で扱われる球形粒子と実験的にガラスになる異方的な分子液体とのギャップがガラス転移研究における大きな問題であったが、それを乗り越える第一歩として重要な研究である。

3 日目の最初はガラス転移・ジャミング転移の理論についてのセッションであった。ジャミングは粉体系の密度を高めたときに粘性率が転移点近傍で漸近的に発散する現象であり、ガラス転移との関連が注目されている。最初の講演では、ランダムピニング系のガラス転移が議論された。ランダムピニングとは自由度の一部を凍結(ピニング)することにより、通常は緩和時間増大のため到達できない理想ガラス転移を高温に引き上げる手法である。エントロピー零のガラス転移温度 T_K と緩和時間が発散する動的ガラス転移温度 T_d が一致するピニング密度が存在するなどの重要な結果が得られた。2 番目の講演では、Liouville 方程式から出発して、ジャミング転移点での粘性率の発散が再現された。3 番目の講演では、ガラス転移・ジャミング転移の力学物性(シア応答)とスピングラスの磁場応答に類似の履歴現象が存在することが示された。固体物理系のガラス転移・相転移と題した 2 番目のセッションは、正に本研究会の広域性を示すものであった。前述したランダム一次転移理論は平均場スピングラス模型から派生したものであるが、最初の講演では、平均場を越えたスピングラス模型(Potts 模型)において、ランダム一次転移理論と整合する結果が得られた。2 番目の講演では、ある種の有機導体において、低温で電荷秩序を起こさず電荷が凍結する“電荷ガラス”というべき状態が出現することが示された。3 番目の講演では、多孔質グラファイトに吸着したヘリウムの薄膜がガラス転移様の挙動を示すことが示された。研究会最後のセッションでは、核共鳴X線散乱、μSR などの新しい手法を用いた高分子の緩和の研究、食品蛋白質の中性子散乱と計算機シミュレーションによる研究、上皮組織の恒常性を表現するダイナミクスモデルの研究(ガラス転移的な挙動が見られる)、1024 万粒子の巨大 3 次元系のガラス転移のシミュレーション研究が発表された。

初日と 2 日目の午後に行われたポスターセッションでは、口頭発表の内容に近いテーマから全く異なるテーマ(例えば磁性コロイドや水素吸蔵物質)まで、非常に幅広いテーマの発表が行われた。約 20 件の発表に対して 2 時間という余裕のあるプログラムであったため、口頭発表者を中心としたシニアの研究者と若手研究者の間で非常に密な議論が繰り広げられた。一つ問題があったとすれば、非常に暑い時期であったため、ポスター会場(6 階の渡廊下)が決して心地よい状態で無かったことである。酷暑の中でポスター発表をして頂いた方々には、お詫びするとともに、心から感謝したい。

以上のように、発表内容はガラス転移の基礎理論から生物系や強相関電子系の実験まで非常に多岐にわたっており、し

かも物性研内部の研究テーマからはかなり異なっていたにもかかわらず、全てのセッションで休憩時間がほとんど無くなるほど活発な討論が行われた。これは、発表者の方々が専門外の聴衆に配慮した話をされたこと、逆に聴衆の方々は初歩的な質問や全く異なる立場からの質問を遠慮無くして頂いたことによる。研究会の参加者全員に心から御礼申し上げる。

最後に、本ワークショップの企画・準備・開催・報告の各段階で、多くの物性研事務部および各研究室の方々にご協力いただいた。特に、旅費・宿泊の事務全般を一人で担当してくれた山室研秘書の羽部なおみさん、ホームページ・web 登録システムの管理をしてくれた山室研助教の古府麻衣子さん、当日の受付や要旨集の作成で力を貸してくれた中性子科学研究施設補佐員室の安保真理子氏さんと大串彩子さんに、この場を借りて感謝したい。

以下に研究会で撮った何枚かの写真とプログラムを掲載する。講演要旨集については、まだ残部がかなりあるので、提案代表者(yamamuro@issp.u-tokyo.ac.jp)にご連絡をいただければお送りしたい。

集合写真

講演会場

懇親会

7 月 30 日（木）10 : 00 ~　　（20-25 分講演 ＋ 5-10 分討論 ＝ 30 分／人）

10 : 00 ~ 10 : 15　所長挨拶（瀧川 仁）・趣旨説明（山室 修）

【セッション 1】10 : 15 ~　ガラス・液体の構造とエントロピー　座長　深尾 浩次

1. 山室 修（東大物性研）　単純分子ガラスの構造と緩和
2. 小原 真司（物材機構）　ZrO_2 融体の構造
3. 高田 章（旭硝子）　主要な酸化物ガラスの構造シミュレーションとその課題
4. 梶原 行夫（広島大）　液体のエントロピーを測る

12 : 15 ~ 13 : 30　昼休み

【セッション 2】13 : 30 ~　液体・ガラスの理論・シミュレーション　座長　小田垣 孝

5. 田中 肇（東大生研）　液体の局所構造化のガラス転移・結晶化における役割
6. 金 鋼（新潟大）　四面体ネットワーク形成の制御がガラスのフラジリティを系統的に変化させる
7. 巾崎 潤子（東工大）　イオン液体の分子動力学－仮想ネットワークの形成とガラス転移－

15 : 00 ~ 17 : 00　コーヒーブレイク&ポスター発表１（奇数番号）

【セッション 3】17 : 00 ~　高分子系のガラス転移・ダイナミクス　座長　田中 肇

8. 猿山 靖夫（京工繊大）　温度変調非線形誘電測定法による α 過程緩和時間の温度追随性
9. 深尾 浩次（立命大）　単層および積層高分子薄膜のガラス転移とダイナミクス
10. 小泉 智（茨城大）　ガラス転移温度が大きく異なる高分子ブレンドの濃度揺らぎ

18 : 45 ~ 20 : 45　懇親会

7 月 31 日（金）9 : 00 ~

【セッション 4】9 : 00 ~　ポリアモルフィズム・液液相転移　座長　山室 憲子

11. 鈴木 芳治（物材機構）　低濃度グリセロール水溶液ガラスのポリアモルフィック転移
12. 辰巳 創一（京工繊大）　細孔内に封じ込められたシクロヘキサンにおける液体相の発見
13. 名越 篤史（阪大）　シリカ細孔内のヒドロキシルアミン水溶液の相挙動の温度・圧力依存性

10 : 30 ~ 10 : 50　コーヒーブレイク

【セッション 5】10 : 50 ~　液体・過冷却液体の理論・シミュレーション　座長　池田 昌司

14. 小田垣 孝（東電大）　過冷却液体の結晶化
15. 古川 亮（東大生研）　過冷却液体の流体輸送解析
16. 礒部 雅晴（名工大）　2 成分剛体球過圧縮液体に拡張された動的協働促進理論

12 : 20 ~ 13 : 30　昼休み

【セッション 6】13 : 30 ~　液体・ガラスの誘電分光　座長　猿山 靖夫

17. 野嵜 龍介（北大）　水素結合性液体の誘電ボゾンピーク
18. 森 龍也（筑波大）　テラヘルツ時間領域分光による非晶質薬剤のボソンピークの検出
19. 佐々木 海渡（東海大）　水溶液中の水とアモルファス氷の誘電緩和

15 : 00～17 : 00　コーヒーブレイク&ポスター発表２（偶数番号）

【セッション 7】17 : 00 ~　ガラス転移・シアシックニングの理論　座長　宮崎 州正

20. 瀬戸 亮平（沖縄科技大）　コロイド分散系のシアシックニング
21. 川﨑 猛史（名大）　サスペンション系におけるシアシックニングのメカニズム：慣性および粒子間摩擦の影響
22. 池田 昌司（京大）　少し複雑な系のガラス転移：レプリカ理論によるアプローチ

8 月 1 日（土）9 : 00 ~

【セッション 8】9 : 00 ~　ガラス転移・ジャミング転移の理論　座長　瀬戸 亮平

23. 宮崎 州正（名大）　ランダムピニング系のガラス転移
24. 早川 尚男（京大基研）　剪断粉体系でのジャミング転移近傍での粘性率の発散に関するミクロ理論
25. 吉野 元（阪大）　ガラス・ジャミング系における 1+連続レプリカ対称性の破れと力学物性

10 : 30 ~ 10 : 50　コーヒーブレイク

【セッション 9】10 : 50 ~　固体物理系のガラス転移・相転移　座長　早川 尚男

26. 福島 孝治（東大）　3 次元スピングラス模型におけるランダム一次転移
27. 賀川 史敬（理研）　強相関電子系における電荷の結晶化と急冷によるガラス化
28. 簑口 友紀（東大）　グラファイト上ヘリウム結晶薄膜のガラス状態と超流動近接効果

12 : 20 ~ 13 : 30　昼休み

【セッション 10】13 : 30 ~　ソフトマター・生物系のガラス転移・ダイナミクス　座長　野嵜 龍介

29. 金谷 利治（高エ機構）　共鳴 X 線散乱によるガラス形成高分子の動的転移
30. Lou Yuting（東大）　Glass Phenomena in a Multi-cell Receptor-Dynamics Model for Self-Organized Epithelial Homeostasis
31. 中川 洋（原子力機構）　食品蛋白質の動力学転移と水分活性
32. 芝 隼人（東大物性研）　構造ガラスにおける動的不均一性の次元依存性

15 : 30 ~ 15 : 40　クロージング

ポスター発表（奇数番号は 7 月 30 日(木)、偶数番号は 7 月 31 日(金)の 15:00～17:00）

P1.　上田 仁彦（京大）　駆動されたブラウン粒子の軌道におけるレプリカ対称性の破れ
P2.　村中 正（愛知工大）　ガラス形成物質中の協同運動の伝搬速度
P3.　淡路 大輔（新潟大）　短距離古典 MD における高速化技法の再検討：近接リスト法・セル法・ハイブリッド法
P4.　樋口 沙希（新潟大）　Fermi-Jagla ポテンシャルにおける液液転移とダイナミクスの異常性

P5. 水野 勇希（東大物性研） 蒸着法による単純分子ガラスの創成と構造研究
P6. 山口 毅（名大） プレピーク構造を持つ液体のダイナミクスに関する理論的研究
P7. 小林 美加（東大生研） ガラスのエイジングキネティクス
P8. 西山 枝里（千葉工大） アモルファススチレンオリゴマーにおける熱力学的フラジリティーの分子量依存
P9. 横田 麻莉佳（千葉工大） アモルファススチレンオリゴマー熱容量の低温における分子振動解析
P10. 東 信晃（阪大） 免疫グロブリン G-水系における水和水の低温熱物性
P11. 杉本 敏樹（京大） Pt(111)表面に作成した強誘電アモルファス氷薄膜の誘電緩和と結晶転移
P12. 藤村 順（千葉工大） 断熱型熱量計によるアモルファススチレンオリゴマーのエンタルピー緩和
P13. 松尾 隆祐（阪大） 種々のゴムシートに関する力学熱量効果の測定と解析
P14. 吉内 友章（京工繊大） 電場周波数依存性による α 過程緩和時間の温度変調に対する追随性の研究
P15. 奥 祐樹（京工繊大） polyacrylonitrile におけるガラス転移の緩和時間の温度変調に誘起された変化
P16. 谷口 菜摘（立命大） 非晶性ポリアミド薄膜の誘電緩和挙動
P17. 山本 詠士（慶応大） 脂質膜表面での水分子の異常拡散およびエイジング
P18. 阿部 洋（防衛大） イオン液体の不規則性・不均一性・多形性
P19. 国府田 将太（筑波大） コリン系イオン液体のフラジリティと低温凍結保護の可能性
P20. 橋本 侑亮（筑波大） ガラス形成高分子のテラヘルツ時間領域分光・ラマン散乱分光
P21. 坂口 佳史（CROSS） 空間的束縛を受けた液体イオウ高分子の自己秩序化
P22. 水口 朋子（京工繊大） 細孔中のシクロヘキサンで観測される相転移現象のシミュレーション研究
P23. 服部 高典（原子力機構） 石英ガラスの室温高圧下、高温高圧下における構造変化
P24. 齋藤 真器名（京大炉） o-terphenyl、glycerol のミクロな緩和時間の空間スケール・温度依存性
P25. 瀬戸 亮平（沖縄科技大） 磁性コロイド単一層の結晶粒界
P26. 池田 晴國（名大） 二成分系のガラス転移における転移点の分離
P27. 宮崎 涼二（名大） 一般化 Hertzian 型相互作用系のガラス転移
P28. 髙田 智史（京大基研） 2 次元粉体の抵抗則
P29. 高江 恭平（東大生研） 配向自由度のある粒子系におけるガラス形成とその外場応答
P30. 新屋敷 直木（東海大） 部分的に氷結したゼラチン水溶液の α 緩和と不凍水量に関する誘電的研究
P31. 秋葉 宙（東大物性研） パラジウム水素化物の熱容量とガラス転移 –水素拡散運動の凍結–
P32. 大友 季哉（KEK） 高強度中性子全散乱装置(NOVA)による非晶質・液体構造解析
P33. 古府 麻衣子（東大物性研） イオン液体の階層的・ガラスダイナミクス
P34. 原田 国明（京大） アモルファス氷薄膜の結晶化に対する Pt(111)基板の影響
P35. A. V. Gubarevich（東工大） Effect of NaCl concentration on the structure of water studied by molecular dynamics simulation
P36. 田邊 章洋（広大） DEM を用いた 3 次元粉体層内部の応力伝播過程の研究
P37. 客野 遥（神奈川大） カーボンナノチューブに内包された水の挙動
P38. 高塚 将伸（東海大） 誘電分光法による Poly(vinyl methyl ether)水溶液の水と溶質のガラス転移
P39. 萬代 健太（東海大） 広帯域誘電分光法による 1-プロパノール-水系のガラス転移
P40. 柴田 薫（原子力機構） 背面反射型 TOF 分光器(DNA)High-Q Si311 アナライザーによる 1/1 近似結晶 Zn6Sc 中の正四面体 Zn4 クラスターの動的転移
P41. 野村 肇宏（東大物性研） 液体酸素の磁場誘起液-液相転移の可能性

物性研究所談話会

標題：鉱物といふもの
日時：2015 年 7 月 23 日(木)　午前 11 時～午後 0 時
場所：物性研究所本館 6 階 大講義室（A632）
講師：浜根 大輔
所属：東京大学物性研究所電子顕微鏡室
要旨：

物理・化学をはじめ、多くの学術領域においてペロブスカイトやスピネルなどの単語は頻繁に登場し、これらは我々にとって比較的なじみが深い単語である。しかしその一方で、その単語が本来何を意味しているかを知っている人はいるだろうか。いや、そもそもこれらの単語がいつどのようにして生まれ、どうやってそれが認知されるのか。結論から言うと、これらの単語は「鉱物」という物質の名前であり、国際鉱物学連合が学術的に公認する。そして毎年のように新しい鉱物が発見されている。そう「新種」である。新種の発見、それは世界初への挑戦でもあり、栄光を勝ち取るには何よりもチャンスに気づくことが大切である。ここでは、鉱物とは何か、そして、新種が学術界で公認・公表される過程などを、自身の経験を例に挙げながら話題として提供する。鉱物研究の意義や面白さ、鉱物の魅力についても触れてみたい。

標題：高圧力下物性研究と装置開発 －電子相転移近傍で現れる興味深い物性現象－
日時：2015 年 9 月 24 日(木)　午前 11 時～午後 0 時
場所：物性研究所本館 6 階 大講義室（A632）
講師：上床 美也
所属：東京大学物性研究所極限環境物性部門
要旨：

最近、圧力効果の研究を多くの研究会で良く目にする様になった。私が学生の頃は一部の研究者の特殊技術による研究であると思われていた。しかし、1990 年代後半、安価で取り扱いの容易なピストンシリンダー型圧力装置で 3 GPa を超える圧力が手軽に発生出来る様になった。この技術革新により、多くの研究者が高圧力下の物性研究を行える様になり、この分野の研究が飛躍的に進歩してきている様に思われる。

圧力効果の利点は、物質の構成元素を変えること無く原子間距離(相互作用)を変えられることに尽きる。もちろん距離は縮まる方向だけで、伸びる方向は特殊な場合を除いて実現しないが、大体 1GPa あたり 1%程度の割合でボリュームが減少する。この程度の体積変化に対して、最も顕著な変化が現れる物理現象の一つが近藤効果である。f 電子を 1-2 個持つ希土類化合物において、近藤効果と磁気秩序の競合を圧力によりコントロールすることにより、その臨界領域で超伝導を始めとした興味深い物性現象が出現する。ここ十数年 Ce 化合物を始めとした多くの興味深い現象が様々な物質で報告されてきている。

研究室ではこの様な圧力誘起の新奇物性現象を発見すべく、装置開発と共に研究を重ねてきた。高みに登るとより広く見渡せるが如く、より高い圧力を精度良く容易に発生させることにより、多くの物質や物性現象が研究対象となり、様々な新奇物性を発見出来る機会が多くの研究者に増えると期待される。最近、装置に飛躍的進歩のあった Cubic Anvil 圧力装置を用いた研究により興味深い現象を見つけることが出来た。講演では、最近得られた軌道秩序近藤物質 PrTi2Al201)や遍歴強磁性体 MnP2)の興味深い圧力下での物性現象について議論すると共に装置の現状を紹介したい。

1) K. Matsubayashi, *et.al.*, Phys. Rev. Lett., 109, 187004, 2012.
2) J.G. Cheng, *et.al.*, Phys Rev Lett, 114, 117001, 2015.

物性研究所セミナー

標題：放射光セミナー：タンパク質の立体構造で生命を理解する－がん抑制や神経回路形成を例として
日時：2015 年 7 月 22 日(水)　午後 1 時～
場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）ＴＶ会議　SPring-8 会議室
講師：深井 周也
所属：東京大学放射光連携研究機構生命科学部門構造生物学研究室
要旨：

生命の設計図は DNA であるが、生命現象の現場で中心的な役割を担うのはタンパク質である．タンパク質が多様な生体分子と相互作用して複合体を形成することで、物理的あるいは化学的なシグナルを受容、伝達そして応答し、様々な生命現象が引き起こされる。したがって、生命を理解するには、無数に存在するタンパク質複合体の作動機構を理解する必要がある．放射光連携研究機構生命科学部門では、タンパク質複合体の立体構造決定によりその作動機構を明らかにし、様々な生命現象の理解を進めてきた。本セミナーでは、最近プレスリリースをおこなった「がん抑制の仕組み」「神経回路形成の仕組み」に関する研究成果について紹介したい。

標題：理論セミナー：Interatomic potential of iron based on machine learning
日時：2015 年 7 月 24 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：尾崎 泰助
所属：東京大学物性研究所
要旨：

Prediction of crystal structures for alloys and compounds with arbitrary composition of elements has not been widely performed yet, while current first-principles electronic structure calculations based on density functional theories (DFT) might have enough accuracy in predicting crystal structures in most cases. One of reasons for that is due to a large computational cost to explore vast configuration space in structural prediction by using molecular dynamics and Monte Carlo simulations based on DFT. In this talk, we report an ongoing research to develop an accurate interatomic potential of iron using a neural network (NN) method being a machine learning technique as a first step towards structural prediction of magnetic intermetallic compounds. Behler et al. proposed a way of developing accurate interatomic potentials using NN by letting NN learn a series of DFT calculations [1]. In addition to two- and three-body structural symmetry functions as structural fingerprint proposed by Behler, we further introduce four kinds of spin symmetry functions to develop interatomic potentials using NN which can treat crystal and spin structures on the same footing. The total energies of reference systems with an arbitrary spin structure, BCC, FCC, HCP, simple cubic, diamond, and their distored structures with ferro-, antiferro-, and non-magnetic, random spin structures, were carefully calculated by using a constraint scheme, which has been newly developed, based on non-collinear DFT [2], and all the calculated data were assembled to form a database as reference. By providing the database as a trainnig set, we trained NN with a feed-forward network structure of four layers using a back propagation, stochastic mini-batch decent, and residual minimization method. It is found that the mean difference between the reference DFT data and NN is 9.6 meV/atom, which suggests that a highly accurate interatomic potential can be developed for magnetic systems. We also discuss how the potential can be utilized to simulate crystal and spin dynamics on the same footing.

[1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401.
[2] http://www.openmx-square.org/

標題：第 31 回 極限コヒーレント光科学セミナー：コヒーレントフォトン技術によるイノベーション創出
日時：2015 年 7 月 31 日(金)　午後 3 時～午後 4 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）
講師：湯本 潤司
所属：東京大学　理学系研究科
要旨：

レーザー技術の進歩により、レーザーの電気から光への変換効率が飛躍的に向上しつつある。そして、「フォトンコスト」は劇的に低下し、金属やガラスの切断、融着など、様々な製造現場にレーザーが導入されつつある。しかしながら、レーザー光による切断を考えた場合、その現象は、「非線形」、「非平衡」、「開放系」という非常に難しい物理であり、その本質は、未解明の部分が多く、今後のレーザー加工技術の性能向上、また、それによって製造された製品の信頼性確保などの点で、基礎に立ち戻った取り組みが求められている。さらに、フェムト秒領域の極短パルス光を用いた場合は、非熱的なレーザー加工が期待され、これまでのレーザー加工技術を大きく変える可能性が秘められている。

その一方、最近、欧米では、「Industry 4.0」や「Industrial Network」という取り組みが話題になっている。これは、製造技術と情報ネットワークの融合による製造現場での革新を目指したもので、ターゲットの一つとして mass production から mass customization へのコンセプトの転換も上げられている。さらにその先に進めるためには、デジタル化と加工技術の融合だけではなく、材料や素材、更には学理も含めたトータルソルーションとして考える必要がある。

我々は、文科省/JST　COI Stream プログラムの一つとし、「コヒーレントフォトン技術によるイノベーション拠点」を推進している。(2013 年 11 月から 9 年間のプログラム) このプログラムでは、参画企業と協力し、ターゲットを明確にしたレーザー技術の究極を追求するとともに、現在のレーザー光加工技術を、「光で切るとは、何か」という基礎に立ち返り、そこでの知見を、新しいテクノロジー、イノベーションにまで発展させることを目指している。

我々の取り組みを紹介すると共に、産学連携についても議論させていただきたい。

標題：ナノサイエンス・セミナー：Hydrogen Storage in Graphene
日時：2015 年 8 月 5 日(水)　午後 1 時～午後 2 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室（A615）
講師：Prof. Stefan Heun
所属：Istituto Nanoscienze-CNR and Scuola Normale Superiore
要旨：

The realization of innovative hydrogen storage materials has worldwide strategic importance. Graphene has recently attracted attention as a promising hydrogen storage medium. Indeed, graphene is lightweight, chemically stable, and exhibits attractive physico-chemical properties for hydrogen adsorption. Furthermore, the interaction between hydrogen and graphene can be controlled by chemical functionalization.

The energetics of the chemisorption of hydrogen on graphene can be modified by the local curvature of the graphene sheet. Based on scanning tunneling microscopy (STM) we report on site-selective adsorption of atomic hydrogen on convexly warped regions of monolayer graphene grown on SiC(0001). This system exhibits an intrinsic curvature owing to the interaction with the substrate [1]. We show that at low coverage hydrogen is found on convex areas of the graphene lattice [2]. No hydrogen is detected on concave regions. These findings are in agreement with theoretical models which suggest that both binding energy and adsorption barrier can be tuned by controlling the local curvature of the graphene lattice. This curvature-dependence combined with the known graphene flexibility may be exploited for storage and controlled release of hydrogen at room temperature.

Theoretical studies regarding metal atoms (e.g. Ti) deposited on graphene suggest that such materials can adsorb up to 8 wt% gravimetric density of hydrogen. We investigate the deposition of Ti on graphene and its potential for hydrogen storage [3]. The Ti atoms form small islands (diameter ~ 10 nm). The Ti-covered graphene was exposed to molecular hydrogen, and then the sample temperature was increased while measuring the mass-sensitive desorption. These desorption spectra show two peaks at 210°C and 290°C. Their intensity increases with increasing Ti coverage. Our data demonstrate the stability of hydrogen binding at room temperature and show that the hydrogen desorbs at moderate temperatures – both ideally matching technical requirements for hydrogen storage. To further increase the hydrogen uptake of these samples we have recently increased the active surface for hydrogen adsorption by decreasing the size of the Ti-islands and increasing their density [4].

1.S. Goler, C. Coletti, V. Piazza, P. Pingue, F. Colangelo, V. Pellegrini, K. V. Emtsev, S. Forti, U. Starke, F. Beltram, and S. Heun, Carbon 51, 249 (2013).

2.S. Goler, C. Coletti, V. Tozzini, V. Piazza, T. Mashoff, F. Beltram, V. Pellegrini, and S. Heun: J. Phys. Chem. C 117, 11506 (2013).

3.T. Mashoff, M. Takamura, S. Tanabe, H. Hibino, F. Beltram, and S. Heun: Appl. Phys. Lett. 103, 013903 (2013).

4.T. Mashoff, D. Convertino, V. Miseikis, C. Coletti, V. Piazza, V. Tozzini, F. Beltram, and S. Heun: Appl. Phys. Lett. 106, 083901 (2015).

標題：放射光セミナー：「チオール自己組織化単分子膜の高度機能化に向けた基礎研究：光励起と複官能基化」

日時：2015 年 9 月 1 日(火)　午前 11 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）ＴＶ会議　SPring-8 会議室

講師：加藤 浩之

所属：大阪大学大学院 理学研究科

要旨：

発光や受光を担う分子デバイスにおいて、電子/正孔の生成と動的挙動は、光電変換特性を決める重要な要素である。本研究では、まず官能基を付加した自己組織化単分子膜(SAM)を作製し、分子配向や電子準位を明らかにした上で、光励起電子のダイナミクスにおける基板－励起子間の相互作用について研究してきた。

アルカンチオールの末端にクアテルチオフェン(4T)を結合させた分子は、メルカプト基が Au(111)基板と Au-S 結合を形成し、アルキル鎖を介して 4T 部位が層状に配列する吸着様式(4TCnS-SAM)をとる(図 1)。よって、アルキル鎖長 n を変化させると、4T 層と基板の距離が変化することが期待される。実験では、赤外反射吸収分光(IRAS)を用いて SAM 内の分子配向を明らかにし、紫外光電子分光(UPS)や 2 光子光電子(2PPE)分光を用いて HOMO/LUMO 由来の準位が 4T 部位にある事を確認した。くわえて、ポンプープローブパルス光間に遅延時間を設けた時間分解 2PPE 分光によって、4T 部位で励起した電子の緩和過程を測定した。その結果、励起電子の減衰速度がアルキル鎖長 n に強く依存することを明らかにした(図 2)。講演では、緩和過程の定量解析を基に、4T 励起状態と Au 基板間の相互作用について議論する。また、今後の展開に関連し、SAM の複官能基化に向けた挑戦についても紹介する。

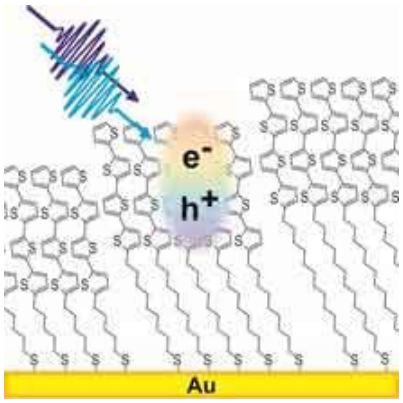


図１．4T 終端アルカンチオール自己組織化単分子膜(4TCnS-SAM)の吸着構造と光励起の模式図。

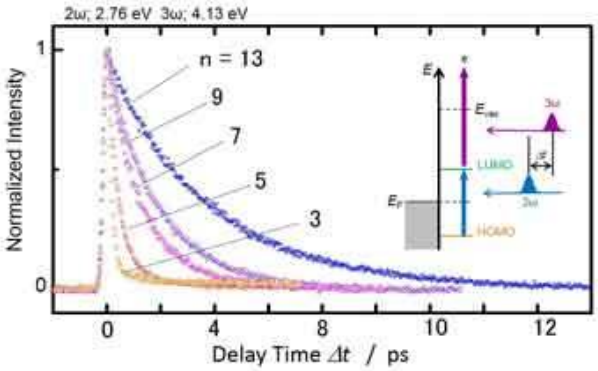


図 2. 時間分解 2PPE 分光を用いて測定した 4TCnS-SAM における励起電子の減衰曲線。減衰速度は、アルキル鎖長 n によって著しく変化する。

標題：理論セミナー：New Route to Room-Temperature Superconductivity: Kondo Singlet State with T_K well beyond 1,000K in the Proton-Embedded Electron Gas

日時：2015 年 9 月 11 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. Yasutami TAKADA

所属：ISSP, The University of Tokyo

要旨：

Hydrogen in metals has attracted much attention for a long time from both basic scientific and technological points of view. Its electronic state has been investigated in terms of a proton embedded in the electron gas mostly by the local spin density approximation (LSDA) to the density functional theory (DFT). At high electronic densities, it is well described by a bare proton H^+ screened by metallic electrons (charge resonance), while at low densities two electrons are localized at the proton site to form a closed-shell negative ion H^- protected from surrounding metallic electrons by the Pauli exclusion principle. However, no details are known about the transition from H^+ to H^- in the intermediate-density region.

In my talk, by accurately determining the ground-state electron density $n(\boldsymbol{r})$ by diffusion Monte Carlo (DMC) simulations with the total electron number N up to 170 combined with LSDA up to $N\rightarrow\infty$, I will give a complete picture of the transition, in particular, a sharp transition from H^+ screening charge resonance with a short screening length to Kondo-like spin-singlet resonance with a very long screening length. The emergence of the Kondo singlet state is confirmed by the presence of an anomalous (oscillation-period shortened) Friedel oscillation characteristic to the Kondo singlet state with quantitatively determining its Kondo temperature T_K, which is well beyond 1,000K for the electronic density parameter r_s in the region of 3-8.

This study not only reveals interesting competition between charge and spin resonances, enriching the century-old paradigm of metallic screening to a point charge, but also discovers a long-sought novel high-T_K system. Note that according to heavy-fermion physics, superconductivity occurs in a Kondo lattice near quantum critical point at a temperature as high as $0.1T_K$. Thus, if a macroscopic number of protons are embedded into a metal (like in the metal hydrides) and those hydrogens are so synthesized as to be arranged in the form of a periodic Kondo lattice with the host metal in this intermediate-density region, we may expect the occurrence of superconductivity at T_c near $0.1T_K$ (which is of the order of the room temperature) at the ambient pressure, contrary to the case of solid hydrogen or sulfur hydrides under very high pressures in which r_s is about 1.4.

Reference: YT, R. Maezono, and K. Yoshizawa, arXiv1507.06432.

標題：強磁場セミナー：グラフェンのサイクロトロン共鳴における多体効果
日時：2015 年 9 月 25 日(金)　午後 3 時～午後 4 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）
講師：浅野 建一
所属：大阪大学理学研究科
要旨：

放物線形のエネルギー分散を持つ電子系に対するサイクロトロン共鳴には相互作用効果が現れない。この事実は Kohn の定理として知られている。しかし、グラフェンに代表される Dirac 電子系（線形のエネルギー分散を持つ二次元電子系）には、この Kohn の定理を適用できないので、サイクロトロン共鳴に電子間相互作用の効果が現れる。

本講演では、グラフェン系のサイクロトロン共鳴に現れる多体効果を、少数電子系の数値的対角化で調べた結果について説明する。まず、単層グラフェン系については、N=0 のランダウ準位から N=1 のランダウ準位への遷移に対応するサイクロトロン共鳴にほとんど多体効果が現れず、Kohn の定理が近似的に成立しているとみなせることが分かった。その一方で、N=-1 から N=2 への遷移に対応するサイクロトロン共鳴には相互作用効果が現れる。時間に余裕があれば、二層グラフェン系に対する結果についても述べたい。

標題：理論インフォーマルセミナー・新物質セミナー：The dynamics of a quantum spin liquid
日時：2015 年 9 月 28 日(月)　午後 1 時～
場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室（A615）
講師：John Chalker
所属：University of Oxford
要旨：

I will describe recent theoretical results on the dynamics of a remarkably simple, exactly solvable model — the Kitaev honeycomb model — that has a spin liquid ground state. In this system, magnetic moments are "dissolved" by quantum fluctuations and reform as new degrees of freedom: mobile fermions and flux lines of an emergent gauge field. I will discuss the implications of this reorganisation, known as quantum number fractionalisation, for measurements of dynamics such as the inelastic neutron scattering response.

標題：光・量子融合連携プログラム合同研究会：極限レーザー・放射光技術の融合から、光エネルギー変換の科学へ
日時：2015 年 10 月 9 日(金)　午前 9 時 30 分～
場所：東京大学フューチャーセンター　1 階多目的ホール
要旨：

近年の極限的なレーザー技術の進展により、テラヘルツから可視、軟 X 線にわたる広い波長領域での光が得られるようになっている。また、放射光における先端的な計測技術も着実に進展しており、X 線を用いた時間分解や顕微分光計測が可能となっており、今後は光源の垣根を越えたさまざまな利用法の開発が大きな課題となっている。このような背景の下で、平成 25 年度から文部科学省「光・量子融合連携研究開発プログラム 」が開始され、レーザー技術と放射光技術の融合による物質科学の創成を目指した二つの研究課題「極限レーザーと先端放射光技術の融合による軟 X 線物性科学の創成（課題責任者：辛埴）」「レーザー・放射光融合による光エネルギー変換機構の解明（課題責任者：足立伸一）」が採択された。これら二つの研究課題に携わる研究グループによる合同研究会を開催し、レーザーと放射光を共通基盤とした新しい物質科学の創成を目指して、現状報告と今後の方向性についての議論を行う。

平成 28 年度前期共同利用の公募について
平成 27 年度後期共同利用課題一覧について

東大物性研第３１８号
平成 27 年 10 月 1 日

関係各研究機関長　殿

東京大学物性研究所長
瀧　川　　仁
（公印省略）

平成 28 年度前期東京大学物性研究所共同利用の公募について（通知）

このことについて、下記のとおり公募しますので、貴機関の研究者にこの旨周知いただくとともに、申請に当たっては遺漏のないようよろしくお取り計らい願います。

記

1　公募事項

(1)　一般、スーパーコンピュータ、物質合成・評価設備、軌道放射物性研究施設の共同利用
（平成 28 年 4 月～平成 28 年 9 月実施分）
(2)　中性子科学研究施設の共同利用　（平成 28 年 4 月～平成 29 年 3 月実施分）
(3)　長期留学研究員　（平成 28 年 4 月～平成 29 年 3 月実施分）
(4)　短期留学研究員　（平成 28 年 4 月～平成 28 年 9 月実施分）
(5)　短期研究会　（平成 28 年 4 月～平成 28 年 9 月実施分）

2　申請資格

国・公立大学法人、私立大学及び国公立研究機関（以下「大学等」という）の教員、研究 者並びにこれに準ずる者。ただし、上記の者が行う大学等の研究活動に限ります。大学院学生にあっては大学等の教員の指導の下、研究を行う者。

3　申請方法等

本研究所ホームページ（http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/joint.html）の募集　要項を参照願います。

4　申請期限

(1)　中性子科学研究施設の共同利用　**平成 27 年 11 月 10 日（火）**
(2)　その他　**平成 27 年 12 月 1 日（火）**

〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5－1－5　東京大学物性研究所共同利用係
電話：04-7136-3209　e-mail：issp-kyodo@issp.u-tokyo.ac.jp

平成 27 年度後期共同利用課題一覧について（お知らせ）

半期号ごとに掲載しておりました共同利用課題一覧については、今号より掲載しておりません。
物性研究所 HP に課題一覧を掲載しておりますので、そちらをご覧くださいますようお願いいたします。
URL：http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/jointlist.html

人　事　異　動

【研究部門等】

○平成 27 年 9 月 30 日付け

（早期退職）

氏　　名	所　　属	職　　名	備　　考
家　　泰　弘	ナノスケール物性研究部門	教　　授	日本学術振興会　理事へ

（辞　職）

氏　　名	所　　属	職　　名	備　　考
渡　邊　　浩	極限コヒーレント光科学研究センター	特任助教	大阪大学大学院生命機能研究科　助教へ

東京大学物性研究所研究員の公募について

このたび、東京大学物性研究所では、下記の要領で研究員を公募いたします。

つきましては、関係各位に広くお知らせいただくとともに適任者の推薦および応募について、よろしくお取り計らいくださるようお願いいたします。

記

１．公募職種：特任研究員
２．公募人員：若干名
３．職務内容：物性科学における実験的または理論的研究
４．応募資格：次の２条件を満たしている者
（１）博士号取得後１０年程度までの者、ただし着任時までに博士号取得が確実に見込まれる者も含む
（２）着任予定時に主たる職、あるいは大学院生および研究生等の身分を有しないこと
＊　なお、応募に際しては、関連する物性研究所所員（教授または准教授）と連絡をとって研究計画等の調整を行うこと。また、複数の研究室にまたがる研究テーマに取り組む方も歓迎する
５．任期：原則として２年間（年度更新）
その後再応募も可（但し、１年間）
６．勤務態様・手当・給与等：
週５日、裁量労働制（週当たり３８時間４５分相当）
雇用保険・文部科学省共済組合に加入、通勤手当有
給与は「東京大学年俸制給与の適用に関する規則」に定める第４条、第５条及び第６条による（年額約４３０万円程度）
７．選考方法：原則として書類選考とし、場合によっては面接を行う
８．提出書類：
（１）履歴書
（２）発表論文リスト
（３）主な論文別刷り（３編以内）
（４）これまでの主な業績のまとめ（２０００字以内）
（５）研究計画（２０００字以内）
（６）指導教員または推薦者による本人に関する意見書
９．公募締切：　平成２７年１１月２０日（金）必着
10．採用予定日：平成２８年４月１日以降
11．書類提出先および問い合わせ先：
〒277-8581　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　04-7136-3501

封筒の表に「物性研究所研究員（○○○○所員担当（連絡をとった所員名を記載））応募書類在中」と朱書きし、書留で郵送すること

東京大学物性研究所の客員教授（准教授）公募のご案内

本研究所において、テーマ（分野）「限定型」およびテーマ（分野）自体を提案いただく「提案型」の客員教授（准教授）を下記のとおり公募します。

記

Ⅰ．公募の区分

１．「限定型」

（１）テーマ（分野）

a：スピン軌道結合の強い電子系における磁気輸送現象の理論的研究

b：スピンメカトロニクス

c：細孔性金属錯体に吸着した酸素分子磁性の中性子散乱

d：超高分解能光電子分光や時間分解光電子分光を用いた強相関物質の研究

e：プロトンー電子機能界面物質

f：表面界面の機能化とダイナミクス

（２）公募人員

a,b,e ： 准教授　各１名、　c,d,f ： 教授　各１名

（３）期　　間　　通年または半期

b,d,e　　平成２８年　４月１日～平成２９年３月３１日（通年）

a,f　　平成２８年　４月１日～平成２８年９月３０日（前期）

c　　平成２８年１０月１日～平成２９年３月３１日（後期）

（４）研究条件

①研究室の供用、その他可能な範囲で研究上の便宜を図る。

②研究費および本研究所との間の往復旅費、滞在費を支給する。

③なるべく多くの時間を本研究所における研究活動に充てること。

２．「提案型」

（１）テーマ（分野）

応募者自らテーマ（分野）を提案する

（２）公募人員　　教授または准教授　２～３名

（３）期　　間　　通年または半期

通年　　平成２８年　４月１日～平成２９年３月３１日

半期（前期）　平成２８年　４月１日～平成２８年９月３０日

半期（後期）　平成２８年１０月１日～平成２９年３月３１日

（４）研究条件

①研究室の供用、その他可能な範囲で研究上の便宜を計る。

②研究費として通年で最大２３０万円（理論１１５万円）、および本研究所との間の往復旅費、滞在費を支給する。

③滞在日数は半期で１ヶ月以上を目途とする。

Ⅱ．公募締切

平成２７年１２月１８日（金）（必着）

Ⅲ．提出書類

（イ）「限定型」の場合

①推薦書または意見書（作成者から書類提出先へ直送）

②履歴書
③業績リスト、主要論文の別刷５編
④研究計画書（本研究所滞在可能期間の推定を含む）

（ロ）「提案型」の場合
①推薦書または意見書（作成者から書類提出先へ直送）
②履歴書
③業績リスト、主要論文の別刷５編
④テーマ（分野）および具体的研究計画
⑤以下の４点について記載したもの
・通年か半期の別
・本研究所における研究関連所員名（複数も可）および関連所員との事前打合せに関する記述（必ず事前に所員と連絡を取ること）
・予定滞在日数
・必要研究経費（概算）

Ⅳ．書類提出先及び問い合わせ先

〒277-8581　千葉県柏市柏の葉５－１－５　東京大学物性研究所総務係
電話 04-7136-3207　　e-mail : issp-jinji@issp.u-tokyo.ac.jp

Ⅴ．注意事項

（１）応募に際しては本研究所所員とあらかじめ連絡を取ること。
（２）封筒に「客員教授（准教授）応募書類在中」または「推薦書（意見書）在中」と朱書きし、書留にて郵送すること。

Ⅵ．選考方法

東京大学物性研究所人事選考協議会の審議に基づき、物性研究所教授会で決定する。

平成２７年９月２４日
東京大学物性研究所長
瀧　川　　仁

編　集　後　記

この秋の出来事と言えば梶田先生のノーベル賞と日本ラグビーの躍進です。この 2 つの、とても高くチャレンジングな目標に向かって何年もかけて準備し、その成果を世界に認めさせた偉業は、前者は勿論後者も世界を意識すべき研究者の心にも響くものがあったのではないでしょうか。

今回の物性研だよりには、3 つのワークショップ・研究会の報告がありますが、このような編集後記を初めて書くにあたり読み直すと、改めて物性研における研究会の質の高さと幅の広さを感じ、主催される先生方の見識の高さと共にこだわりと熱意が伝わってきます。分野の幅、バラエティという点では、電池の充放電における電子状態の研究、気泡生成の計算と 2 件の量子臨界の研究成果報告が唐突に並んでいるのは、今の物性研らしいでしょうか。新しく近藤研の助教になられた黒田氏の記事でも、物性研全体を見渡して良い具合に異なる視点をもった研究室が集まっていると、若手の研究者の目にもそう映っているようです。上田先生の記事では、残念ながら記事の中で書かれているように、この物性研だよりのスペースでは全く足りないので、どこかで改めてたっぷりと書かれることを楽しみにさせて頂きたいと思います。わたくし URA としては、渡辺氏の記事の後半は、広報とアウトリーチという面で勉強になります。尚、2 回ほどお休み致しました担当のインタビュー記事も次号からは再開する予定です。雑多なとりとめのない後記になって申し訳ありませんが、今後とも物性研だよりを宜しくお願い致します。

鈴　木　博　之