

# 物性研究所セミナー

**標題：**理論セミナー：Quantum Simulation of bosonic disordered Synthetic Quantum Matter

**日時：**2016年3月4日(金) 午後4時～午後5時

**場所：**物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**講師：**Prof. Lode Pollet

**所属：**Ludwig-Maximilians-Universität München

**要旨：**

The interplay of disorder with interactions in bosonic quantum matter leads to puzzling phenomena such as a Bose glass phase, where experiments only recently could detect signatures of its behavior. Theoretically, we recently acquired full control over the zero temperature phase diagram in any dimension. The most surprising prediction is the existence of the scratched XY-universality class in one dimension in the strong disorder regime, which hitherto escaped experimental detection. The field of disordered systems recently received a new boost through the advent of many-body localization. Such systems have eigenstates that are nearly all localized, they violate the eigenstate thermalization hypothesis and have highly unusual transport phenomena. I will briefly comment on many-body localization with respect to ongoing experiments in designer experiments, and address the question of the feasibility of numerical approaches other than exact diagonalization.

**標題：**トポロジカル物性と計算物質科学が創出する 新物質科学に関する研究会

**日時：**2016年3月8日(火) 午前10時～午後5時

**場所：**物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**要旨：**

本研究会では、分野融合研究による物質科学研究の新局面を切り拓くため、トポロジカル物性、量子化学、強相関第一原理計算の分野における第一線の研究者の方々に講演をしていただき、議論を行います。特に、量子化学と物性物理の計算手法の融合、トポロジカル物性における強相関効果、強相関物質に対する第一原理計算を用いたアプローチといった分野横断的なトピックについて重点的に議論する予定です。

**標題：**機能物性セミナー「高速一分子蛍光分光法によるタンパク質のフォールディング運動の解明」

**日時：**2016年3月8日(火) 午前11時～午後0時

**場所：**物性研究所本館6階 第1会議室 (A636)

**講師：**高橋 聡

**所属：**東北大学 多元物質科学研究所

**要旨：**

タンパク質は、アミノ酸が一次的につながった高分子鎖であり、アミノ酸の配列により規定される相互作用により、ランダムコイルであり無数の構造を持つ変性状態から、唯一の構造を持つ折り畳まれた状態に転移する(フォールディングする)能力をもつ。タンパク質フォールディングの分子機構を理解することで、タンパク質の構造予測やデザインなどに役立つ知見が得られると期待される。しかし、過去40年以上にわたる活発な研究にもかかわらず、タンパク質の幾つかの重要な物性について互いに矛盾する実験事実が提出され、未だにコンセンサスが得られない状況が続いている。

我々は、蛍光一分子分光法を用いることで、タンパク質のフォールディング運動の解明に取り組んできた。我々の手法の特徴は、独自のアイデアにより、一分子連続蛍光測定における時間分解能を従来の数ミリ秒から劇的に向上し、数十マイクロ秒にまで短縮したことである。また、一分子蛍光測定における構造情報の分解能も向上させた。これまでに、開発した装置を使ってプロテイン A の B ドメイン(BdpA)とユビキチンという二つのタンパク質について、観測と解析を進めてきた。二つのタンパク質について得られたデータをまとめると、変性状態にはミリ秒以上の時定数で起きる構造揺らぎが共通して存在した。また、ミリ秒以上の時間領域においても、変性状態の構造の不均一性が残っていた。我々のデータは、変性状態のタンパク質には明らかな構造の不均一性が存在することを示している。一方で、変性状態のタンパク質は均一なフォールディング転移を示す。これらの観察を矛盾なく説明することは可能だろうか。講演では、これまでに得られたデータから示唆されるタンパク質の特性について議論を行いたい。

**標題：光合成で働く光化学系 II タンパク質の活性中心 Mn4Ca クラスターの価数決定**

**日時：2016 年 3 月 18 日(金) 午前 10 時～午前 11 時**

**場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室 (A636)**

**講師：梅名 泰史**

**所属：岡山大学大学院自然科学研究科付属光合成研究センター**

**要旨：**

光合成の水分解・酸素発生を担う光化学系 II タンパク質(PSII)の活性中心には Mn4Ca クラスターが触媒として存在している。Mn4Ca クラスターは IV 価と III 価の混合原子価状態で存在しており、光化学反応によって高められた酸化力で水を分解している。2011 年、好熱性らん藻由来 PSII の 1.9 Å 分解能の結晶構造から初めて Mn4Ca クラスターの詳細な分子構造が明らかになった(Y.Umena, et al, Nature, 2011)。しかし、4 つの Mn 原子それぞれの価数については、結晶や理論計算による立体構造、X 線吸収や電子スピン共鳴などのスペクトル分析から様々な議論が続いている。今回、Mn の K-吸収端波長 X 線を使った結晶構造解析手法によって、各 Mn 原子の電子状態を解明する研究について紹介する。タンパク質の立体構造と活性中心金属の電子状態を同時に知ることによって、酵素反応をより物理化学的に解明できるものと期待される。

**標題：理論部門・ナノスケール部門合同インフォーマルセミナー：Realization of a directional coupler for single flying electrons transferred by surface acoustic waves**

**日時：2016 年 3 月 24 日(木) 午後 4 時～午後 5 時**

**場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)**

**講師：高田 真太郎**

**所属：Institut Neel, CNRS**

**要旨：**

Electron quantum optics is a field aiming at the realization of photon experiments with flying electrons in nanostructures at the single-electron level [1, 2]. It is considered as an attractive platform to construct scalable quantum systems and a powerful tool to investigate the quantum nature of flying electrons. Necessary tools for such experiments are single-electron sources, single-electron detectors, beam splitters, phase shifters as well as controlled interaction between the electrons.

Recently our group as well as Cambridge group has demonstrated that a single electron can be transferred on-demand between distant quantum dots using a moving potential of surface acoustic waves (SAWs) [3, 4]. This operation formally corresponds to the realization of a single-electron source and a single-electron detector. To perform electron quantum optics experiments with such SAW flying electrons, development of other basic components such as a beam splitter and a phase shifter of the electrons is required.



In this seminar I will present recent experiments where we aim at the realization of a beam splitter as well as a phase shifter for SAW flying electrons. For that purpose we employ a tunnel-coupled wire, which was shown to work as a beam splitter for ballistic electrons [5]. We show that electron transfer across the tunnel-coupled wire can be highly efficient. Controlling the energy detuning of the tunnel-coupled wire allows us to realize a directional coupler for a single SAW flying electron by splitting the electrons into two paths with an arbitrary probability.

- [1] E. Bocquillon *et al.*, Science **339**, 1054 (2013).
- [2] J. Dubois *et al.*, Nature **502**, 659 (2013).
- [3] S. Hermelin *et al.*, Nature **477**, 435 (2011).
- [4] R. P. G. McNeil *et al.*, Nature **477**, 439 (2011).
- [5] M. Yamamoto *et al.*, Nature Nanotech. **7**, 247 (2012).

標題：理論インフォーマルセミナー：Matrix product state representation of quantum Hall quasi-particles

日時：2016年3月30日(水) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Eddy Ardonne

所属：Stockholm University, Fysikum

要旨：

In this talk, I will discuss the matrix product state formulation of fractional quantum Hall states.

In particular, I will focus on the description of quasi-particles, which are more complicated in comparison to quasi-holes due to the Pauli-principle.

Using the matrix product states for the quasi-particles, we can deal with system sizes that are large enough to calculate the statistics properties of the quasi-particles.

標題：SOR Seminar: Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy at Diamond Light Source, the example of quasi-one dimensional  $Tl_2Mo_6Se_6$

日時：2016年4月4日(月) 午後2時～

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

講師：Dr. Moritz Hoesch

所属：Diamond Light Source

要旨：

A beamline for high-resolution angle-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES) has been built at Diamond light Source in the United Kingdom.

The full extent of the project will consist of two instruments, nano-ARPES that is currently under commissioning, and high-resolution HR-ARPES that started full operation in January 2014. In this seminar I will describe the implementation of HR-ARPES and its extended sample preparation facilities and gives a few examples of research that has been conducted.

As a particularly interesting case study I will present data from quasi-one-dimensional  $Tl_2Mo_6Se_6$  where a survey of momentums spaces reveals an indeed highly one-dimensional Fermi surface and peculiar reduction of intensity near  $E_F$  that will be discussed in the context of Tomonaga-Luttinger liquid theory.

標題：理論インフォーマルセミナー：Finite field methods for supercell modelling of charged insulator-electrolyte interfaces

日時：2016年4月8日(金) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Michiel Sprik

所属：University of Cambridge

要旨：

The finite size of atomistic models of interfaces forces us to use slabs introducing a second interface. This is in particular problematic for the modelling of the electric double layers that form at the interface of a charged surface with an ionic solution (the electrolyte). For an insulating slab one now has to choose between surfaces with charge of the same sign, or with opposite sign. The second option of opposite charges is generally regarded as incompatible with periodic boundary conditions because of the net cell dipole moment due to aligned double layers dipoles. We will argue that this is not the case. We will show that the familiar dipole correction applied to cancel the effect of the cell dipole can be regarded as a periodic cell under zero dielectric displacement ( $D=0$ ) boundary conditions in the direction perpendicular to the slab. Omitting this correction gives a system under zero electric field ( $E=0$ ). The double layers on either side are now no longer compensated but acquire a net finite charge of opposite sign. Charge compensation can be restored by application of a finite macroscopic electric field  $E$ . This is demonstrated for a classical force field model (SPC) consisting of a NaCl solution confined by hard walls carrying opposite charge. We will then show how the application of finite fields can be used to obtain an estimate of the capacitance of the double layers.

標題：理論セミナー：Properties and Singularities of the Andreev spectrum in multi-terminal Josephson junctions

日時：2016年4月12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：横山 知大

所属：東京大学物性研究所

要旨：

Recently, superconductor junction attracts great interests in theoretical and experimental studies. Topologically protected state, e.g. Majorana fermion, is one of the main topics for such junctions. Spin-orbit (SO) interaction plays an essential role to induce topological physics. SO interaction is strong in narrow gap semiconductors such as InAs and InSb, and many spin physics are investigated in the quantum well, nanowire, etc. In this study, we investigate Josephson junctions using the semiconductor nanostructures.

We examine multi-terminal Josephson junction. Such junction can be fabricated using crossed nanowires so-called nanocross [1]. For  $N$  superconductors, number of the independent phase differences is  $N-1$ . The ABS energies are  $2\pi$  periodic for all phases. By regarding the phases as "quasi momenta" of the energies, we can consider an "energy band" of the multi-terminal junction. The band shows topological singularities at zero energy, properties of which indicates indicate the Weyl singularity [2,3]. We investigate properties of the Andreev spectrum, e.g. peculiar points and lines at the superconducting gap edge in the presence of strong SO interaction, which have mathematical analogy with the Weyl singular point at zero energy [3]. In addition, we consider protection of gaps, crossing of bunching levels, etc [4].

[1] S. R. Plissard *et al.*, Nature Nanotech. **8**, 859 (2013).

[2] R.-P. Riwar *et al.*, arXiv: 1503.06862.

[3] T. Yokoyama and Yu. V. Nazarov, PRB **92**, 155437 (2015).

[4] T. Yokoyama *et al.*, in preparation.



標題：第 5 回物質・物性セミナー「鉄酸化物：変わりモノ」

日時：2016 年 4 月 12 日(火) 午前 10 時 30 分～午前 11 時 30 分

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：高野 幹夫

所属：岡山大学大学院自然科学研究科

要旨：

- ・ (1)鉄の酸化物は山ほどある。そのほとんどが  $\text{Fe}^{2+}(\text{d}6)$ あるいは  $\text{Fe}^{3+}(\text{d}5)$ を含むものであり、常圧での基底状態は決まって反強磁性絶縁体であるから、 $d$  電子数についても基底状態についてもバラエティ豊かとは言いがたい。わずかではあるが、 $\text{Fe}^{4+}(\text{d}4)$ を含む酸化物が存在して、違った振舞いをみせてくれる。 $\text{SrFeO}_3$ などを紹介する。
- ・ (2)釈迦に説法で恐縮だが、組成、構造とともに「かたち(ありよう)」は性質を決める大切な要素である。*Leptothrix ocracea* とよばれる水棲バクテリアは、 $\text{Fe}^{3+}$ 、 $\text{Si}^{4+}$ 、 $\text{P}^{5+}$ を含む 3nm 径の酸化物粒子と少量の有機繊維からなるチューブ(直径  $1\ \mu\text{m}$ ・長さ $\sim 2\text{mm}$ )をつくる。その使い道を探る研究を紹介する。

標題：理論インフォーマルセミナー：Strong light-matter interaction in materials science: merging QED and TDDFT

日時：2016 年 4 月 13 日(水) 午後 1 時 30 分～午後 2 時 30 分

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：Prof. Angel Rubio

所属：Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Universidad del País Vasco, and FHI Max-Planck-Gesellschaft

要旨：

Computer simulations that predict the light-induced change in the physical and chemical properties of complex systems, molecules, nanostructures and solids usually ignore the quantum nature of light. We have recently shown how the effects of the photons can be properly included in such calculations. The basic idea is to treat the full QED system of particles and photons as a quantum fluid. Here the particles are represented by a charge current, and the photons by a classical electromagnetic field that acts on the current in a very complex manner. This study opens up the possibility to predict and control the change of material properties due to the interaction with light particles from first principles.

Here we will review the recent advances within density-functional a schemes to describe spectroscopic properties of complex systems with special emphasis to modeling time and spatially resolved electron spectroscopies We will discuss the theoretical approaches developed in the group for the characterization of matter out of equilibrium, the control material processes at the electronic level and tailor material properties, and master energy and information on the nanoscale to propose new devices with capabilities. We will focus on examples linked to the efficient conversion of light into electricity or chemical fuels (“artificial photosynthesis”) and the design on new nanostructure based optoelectronic devices, among others.

Our goal is to provide a detailed, efficient, and at the same time accurate microscopic approach for the ab-initio description and control of the dynamics of decoherence and dissipation in quantum many-body systems. This theoretical framework provides a new way to control and alter chemical reactions in complex systems, direct the movement of electrons, selectively trigger physico-chemical processes, and create new state of mater.

標題：理論インフォーマルセミナー：Three-dimensional Kitaev spin liquids

日時：2016年4月20日(水) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Maria Hermanns

所属：Institute for Theoretical Physics, University of Cologne

要旨：

The Kitaev honeycomb model is one of the archetypal examples of topological phases of matter. It has played a crucial role in shaping our current understanding of quantum spin liquid phases in two spatial dimensions. In this talk, we will discuss the rich physics arising for generalizations of the Kitaev model to three-dimensional lattice structures. In these models the low-energy degrees of freedom are Majorana fermions that may form various (semi-)metallic states. I will give a comprehensive classification of the resulting quantum spin liquid phases, as well as discuss their properties and possible experimental signatures.

標題：理論セミナー：Foundation of quantum statistical mechanics from ultracold-atomic perspective

日時：2016年4月22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：池田 達彦

所属：東京大学物性研究所

要旨：

Foundation of quantum statistical mechanics has recently seen a resurgence of interest partly because ultracold atomic systems serve as ideal testbeds. These systems are at very low temperature and in ultra high vacuum, and, thus, can be regarded as isolated quantum systems, which are described by a single pure state evolving unitarily. In experiments, even under the unitary time evolution, effective stationary states have been observed, and they may or may not be thermal depending on the Hamiltonian that describes the system. Many active theoretical studies have been conducted to understand when and how thermalization emerges from quantum mechanics (see e.g., Ref. [1] for an overview).

The first half of this talk will be devoted to a brief introduction to the ultracold-atom systems and to the theoretical approach to the foundation of quantum statistical mechanics. In the second half, I will talk about our recent study on a non-thermal steady state realized in a coherent splitting of a one-dimensional Bose gas [2]. If time allows, I will talk about more pieces of work on this topic.

References:

[1] L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov and M. Rigol, arXiv:1509.06411.

[2] E. Kaminishi, T. Mori, T. N. Ikeda, and M. Ueda, Nature Physics 11, 1050-1056 (2015).



標題：極限セミナー「量子スピン液体物質 Ba<sub>3</sub>CuSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub> の熱輸送特性」

日時：2016年4月25日(月) 午後3時～午後4時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：杉井 かおり

所属：東京大学物性研究所・山下研究室

要旨：

六方晶ペロブスカイト型銅酸化物 Ba<sub>3</sub>CuSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub> は Cu<sup>2+</sup>間の超交換相互作用( $J \sim 55$  K)が存在するにもかかわらず、20 mK までの低温で磁気秩序は観測されていない[1]。一方、Cu<sup>2+</sup>イオンの軌道に縮退が残っているにもかかわらず、静的な Jahn-Teller 歪みは観測されていない[2]。よってこの物質ではスピンの自由度だけでなく軌道自由度も低温まで凍結しない量子スピン軌道液体状態が実現している可能性が提唱されている[1-3]。量子スピン液体状態の詳細を明らかにするために、我々は熱伝導率・熱ホール伝導率測定を行った。参照物質として Jahn-Teller 転移を 200 K で示す斜方晶物質と六方晶物質を比較した。

六方晶 Ba<sub>3</sub>CuSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub> と斜方晶物質とともに、他のスピン液体物質に比べ非常に小さい熱伝導を示す事が明らかとなった。この結果から、この物質特有の Cu<sup>2+</sup>-Sb<sup>5+</sup>ダンベル構造の短距離秩序によってフォノンの平均自由行程が抑えられている事が明らかとなった。また、六方晶物質には明確な熱ホール効果が存在する事がわかった。スピギャップによってスピン励起が消失しているため、フォノン励起による熱ホール効果であると考えられる。

Reference

- [1] S. Nakatsuji *et. al.*, Science 336, 559 (2012).
- [2] N. Katayama *et. al.*, PNAS 112, 9305 (2015).
- [3] J. Nasu and S. Ishihara, Phys. Rev. B 88, 094408 (2013).

標題：理論インフォーマルセミナー

日時：2016年4月26日(火) 午後1時30分～午後3時

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

要旨：13:30-14:10

講師：平岡 喬之

所属：東京大学工学系研究科物理工学専攻

題目：集団運動と集団的意思決定のモデル

生物の群れ運動を数理モデルによってシミュレートする試みは、1980年代にその萌芽が見られるが、自己駆動粒子モデル[1]と連続体方程式[2]の登場により、物理学者の関心を集めるようになった。その後、Vicsek モデルをはじめとする自己駆動粒子系の集団運動の数理について理解が進展するとともに、バクテリアや真核細胞といったマイクロな生物系、さらに加振粉体やコロイドなど非生物を用いた実験系でその非平衡ダイナミクスが調べられている[3]。一方、動物の群れ運動については映像や GPS ロギングを用いた観測により、リーダー／フォロワー関係など、より複雑な相互作用を推定することが可能となった[4,5]。この場合、個体の意思決定の群れ内部での伝播をネットワークとして表現し、分析することができる。本発表では、こうした集団運動・集団的意思決定についての研究をレビューするとともに、発表者がハンガリー滞在中に行ったインターンシップの成果について報告する。

- [1] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, Phys. Rev. Lett. 75, 1226 (1995).
- [2] J. Toner and Y. Tu, Phys. Rev. Lett. 75, 4326 (1995).
- [3] S. Ramaswamy, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 1, 323 (2010).
- [4] M. Nagy, Z. Ákos, D. Biro, and T. Vicsek, Nature 464, 890 (2010).
- [5] U. Lopez, J. Gautrais, I. D. Couzin, and G. Theraulaz, Interface Focus 2, 693 (2012).

14:10-14:20 休憩

14:20-15:00

講師：加藤 洋生

所属：東京大学理学系研究科物理学専攻

題目：Polyexciton stability in multi-valley semiconductor and optical trap for valley exciton

Professional development Consortium for Computational Materials Scientists (PCoMS) is the organization established to develop human resources of computational material science. I participated the internship program of PCoMS and stayed in prof. Varga's group in the Vanderbilt University for almost 1 month in this spring. In this stay. My activity was focused on settling the current research project and putting the next research issue into shape. Current project is the identification of polyexciton stability in multi-band semiconductor and verified up to triexciton bound states by numerical calculation. Next research issue is assessing the feasibility of optical trap for 2D exciton by utilizing optical Stark effect. I will report the details and contributions of the internship to my research.

標題：理論セミナー：Polarization and Large Gauge Invariance

日時：2016年5月13日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Masaki Oshikawa

所属：ISSP, the University of Tokyo

要旨：

Quantum systems on a non-simply connected space possess a "large" gauge invariance. Laughlin utilized this to explain quantum Hall effect [1]. Later, it was applied to elucidate a universal relation between filling factor and energy spectrum in quantum many-body systems on periodic lattices (Lieb-Schultz-Mattis-M.O.-Hastings) [2].

Somewhat surprisingly, the large gauge invariance is also deeply related to modern theory of electric polarization developed by Resta et al [3,4]. I will give an overview of applications of the large gauge invariance to condensed matter physics, and also discuss most recent results obtained by combining it with the theory of polarization [5].

References:

- [1] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B 23, 5632 (1981).
- [2] M. O., Phys. Rev. Lett. 84, 1535 (2000).
- [3] R. Resta and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. 82,370 (1999).
- [4] M. Nakamura and J. Voit, Phys. Rev. B 65, 153110 (2002).
- [5] Y.-M. Lu, Y. Ran, and M. O., in preparation





**標題：ナノ形状設計に基づく人工細胞膜の安定化とそのセンサ応用**

**日時：2016年5月19日(木) 午前11時～午後0時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：平野 愛弓**

**所属：東北大学大学院医工学研究科**

**要旨：**

細胞膜は厚さ 4-5 nm の自然界のナノ薄膜であり、化学的、光学的、機械的刺激に対する高感度なバイオセンサでもある。その構造は、リン脂質分子が二層向かい合って整列した脂質二分子膜を基本構造とし、その中にイオンチャネル等の膜タンパク質が埋め込まれて構成されている。イオンチャネルは細胞膜における高度な情報伝達を担っており、創薬分野における主要な開発ターゲットでもある。また、近年は、致死性の薬物副作用を引き起こすイオンチャネル(human ether-a-go-go-related gene (hERG) チャネル)の問題から、創薬分野においてイオンチャネルに対する薬物(副)作用を評価すること、特にチャネル機能をチャネル電流として記録しながら薬物作用を評価することの重要性が高まっている。現在は、生体膜におけるチャネル電流を記録するパッチクランプ法が主に用いられているが、全細胞電流を記録するため、細胞の状態や共存チャネルの影響を受けやすい等の問題点を抱えている。一方、細胞膜を模した脂質二分子膜中にチャネルタンパク質を包埋した人工細胞膜系は、細胞状態に依存しない薬物作用評価系として注目を集めているが、脂質二分子膜の脆弱性がその発展の障壁となっていた。本講演では、半導体微細加工と脂質二分子膜形成の融合により脂質二分子膜の安定化を達成した我々のアプローチと、それを hERG チャネル副作用評価系へと展開した最近の例を中心に紹介したい。

**標題：理論セミナー：アモルファス金属酸化物にある普遍的な秩序と不規則構造の記述法**

**日時：2016年5月20日(金) 午後4時～午後5時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：西尾 憲吾**

**所属：産業技術総合研究所機能材料コンピューショナルデザイン研究センター**

**要旨：**

HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Cu<sub>2</sub>O, Li<sub>2</sub>O などのアモルファス金属酸化物の原子構造を包括的に捉えた「二重ランダム充填構造」という考え方を導入し、一見複雑に見えるアモルファス金属酸化物には単純で普遍的な中距離秩序が存在することを説明する[1,2]。続いて、中距離よりも遠い秩序を系統的に調べるために必要な言葉が欠如していることを指摘し、その問題を解決するために創出した数理的手法を説明する[3,4]。不規則原子配列をボロノイ多面体タイリングで表現できるが、構成要素であるボロノイ多面体の配列パターンを数列で表現できれば、対応する原子配列を表現したことになる。本手法は、多面体を構成する多角形の組み合わせに関する規則を利用して、多面体を多面体コードワードという数列で表す。この考え方を拡張して、ボロノイ多面体タイリングを多面体コードワードの並び(多胞体コードワードという)で表す。

[1] Universal Medium-Range Order of Amorphous Metal Oxides, PRL **111**, 15502 (2013).

[2] Dual-Random-Sphere-Packing Structure of Liquid and Amorphous Li<sub>2</sub>O, Trans. Mat. Res. Soc. Japan, **40**, 141-144 (2015).

[3] How to describe disordered structures, Sci. Rep. **6**, 23455.

[4] アモルファス材料などの不規則な原子配列を表現する数理的手法を創出

標題：第 37 回極限コヒーレント光科学セミナー「シリコン半導体単結晶における高速光歪効果の観測」

日時：2016 年 5 月 23 日(月) 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：田中 義人先生

所属：兵庫県立大学大学院 物質理学研究科

要旨：

物質に光を照射することにより、非熱的過程で試料サイズが変化する現象は、光歪(photostriction)と呼ばれている[1]。光歪現象は、大きく分けて、強誘電体、極性半導体、非極性半導体、有機材料で見られる。有機高分子材料では、光反応で分子の形状変化が起こり、体積変化が生じる。また、強誘電体や極性半導体では、光励起により内部電場が変化し、逆圧電効果により歪みが生じる。一方、非極性半導体では、直接的に過剰キャリアに起因して歪むと言われている。我々は、特にこの非極性半導体で起こるとされる光誘起歪みダイナミクスに注目し、その光励起条件依存性を調べている。短パルス光励起における過剰キャリア生成と歪みの関係を調べ、光歪効果における電子-格子間エネルギー移行を明らかにすることを目的としている。

結晶試料における格子の過渡的な歪みは、高輝度放射光 X 線光源を用いることにより、高精度かつ高時間分解能で X 線回折測定により観測することができるようになった [2]。さらに X 線自由電子レーザーが開発されたことで、大強度のフェムト秒パルス X 線が得られるようになり、過渡的なフェムト秒現象にも迫れるようになった[3]。我々は、これまでに、厚さ約 1 mm の半導体ウェハー上に波長 800 nm のレーザーを照射することによって発生させた高速歪みを観測し、その初期歪みは、GaAs ウェハーの場合では膨脹、Si ウェハーの場合では収縮であることがわかった[4]。GaAs ウェハーについては、表面近傍での初期歪みの時間応答 200 ps 程度の振る舞いについて詳細に観測し、表面法線方向に音響フォノンが発生している様子も確認できた[5]。Si ウェハーにおいては、最初の約 1 ns で格子の圧縮が起こり、それが熱膨脹へと変わっていく様子をとらえた。一方、これらの過渡歪みの計測では、試料がレーザーで励起される深さ方向の領域、および、X 線で観測される深さ方向の領域の関係によりその歪みの時間的振る舞いに差異が生じることもわかった。そのため、X 線の浸入長が変わる光学配置を適用したり、レーザーの波長を変えたりすることにより、様々な時間依存性が観測された。

そこで、励起・観測領域を一定にするために、薄膜単結晶試料を用いた。図 1 は、厚さ 100 nm の SOI(Silicon on Insulator)に対して、励起レーザーの波長を変えて測定した例である。波長 400 nm のレーザーで励起したときには膨脹が、波長 800 nm の場合には、圧縮後膨脹が観測されていることがわかる。これは、非極性半導体における光歪効果と、フォノン発生に伴う格子膨脹の競合の結果現れている振る舞いと推察されるが、現在議論中である。

この光歪現象は、半導体中の過剰キャリアの励起状態と密接に関わっているため、観測されている歪みに対する、電子状態の時間的振る舞いを知ることがたいへん重要である。セミナーでは、これらの対応を調べる手法についても議論したい。

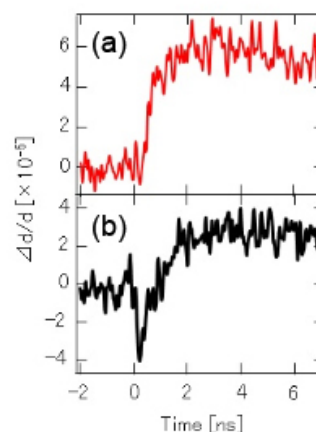


図 1：薄膜単結晶(SOI)における、波長 (a) 400 nm および(b) 800 nm での光励起による格子歪みの時間変化。縦軸は格子定数の変化率である。

[1] B. Kundys, Appl. Phys. Rev. 2, 011301 (2015).

[2] Y. Tanaka, Frontiers in Optical Methods: Nano-characterization and coherent control, Springer, pp. 85-103 (2013).

[3] Y. Tanaka et al., J. Ceramic. Soc. Jpn. 121, 283 (2013).

[4] Y. Hayashi et al., Phys. Rev. Lett., 96, 115505 (2006).

[5] Y. Tanaka et al., J. Phys. Conf. Ser., 278, 012018 (2011).