

物性研だより

BUSSEIKEN DAYORI

第57巻
第4号
2018年1月

ゾル-ゲル変化を自ら繰り返す、アメーバのような新物質を人工的に合成

見る方向や光の偏光によって三色に変化する物質
-5d電子系化合物が示す新たな機能性

鉄系超伝導体FeSeの硫黄置換における
三次元圧力下電子相図

電子の「震え」現象と伝導度揺らぎ



東京大学物性研究所

Copyright ©2017 Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

contents

- 1 ゾル - ゲル変化を自ら繰り返す、アメーバのような新物質を人工的に合成

小野田 実真、吉田 亮、柴山 充弘

- 4 見る方向や光の偏光によって三色に変化する物質

— 5d 電子系化合物が示す新たな機能性

平井 大悟郎

- 7 鉄系超伝導体 FeSe の硫黄置換における三次元圧力下電子相図

松浦 康平、芝内 孝禎、上床 美也

- 10 電子の「震え」現象と伝導度揺らぎ

中村 壮智、勝本 信吾

- 13 レーザー学会第 45 回定時総会レーザー学会奨励賞を受賞して

中村 卓磨

- 15 USD10 にて Young Researcher Poster Award を受賞

伊藤 俊

- 17 国際会議 Actinides2017 において Student poster award を受賞して

中村 翔太

- 19 国際会議 International Conference on Inelastic X-ray scattering (IXS2017) にて
“POSTER PRIZE”を受賞して

横山 優一

- 21 J-Physics 国際会議において“Best Poster Award”を受賞して

谷口 貴紀

- 22 コロイドおよびポリマー科学レクチャー 2017

柴山 充弘

- 24 物性研に着任して

酒井 明人

- 25 外国人客員所員を経験して

Akira Otsuki

- 27 平成 29 年度 物性研究所一般公開の報告

山室 修

【物性研究所短期研究会】

- 33 ○物性研スパコン共同利用 CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」の報告

【ISSP ワークショップ】

- 36 ○第 5 回伊藤国際学術研究センター会議 (IIRC-5)
「Frontier Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces:
From a Single Molecule to Catalytic Reaction」の報告

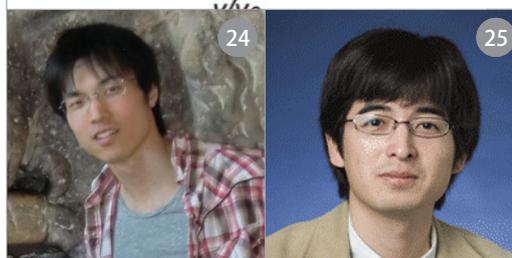
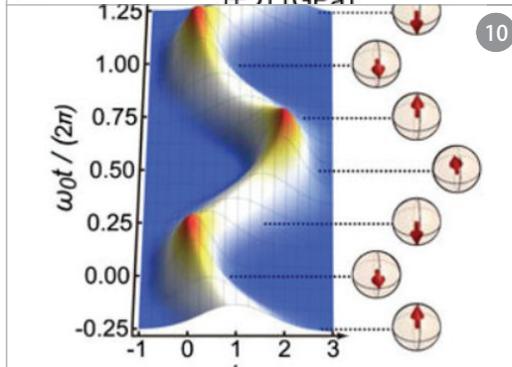
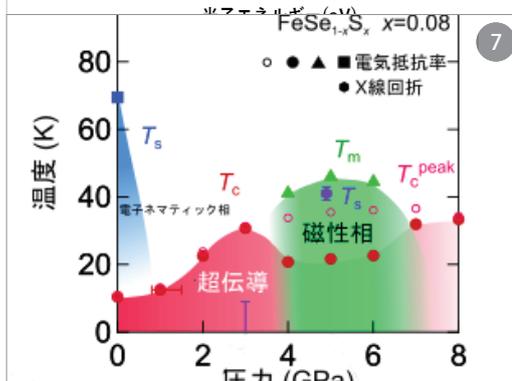
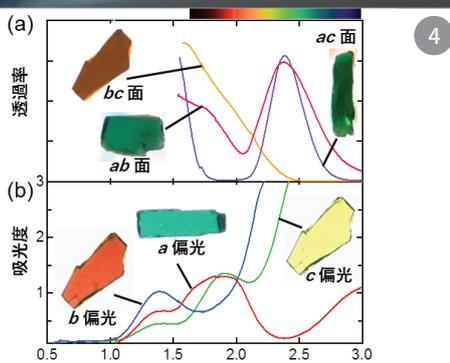
吉信 淳

- 43 第 62 回物性若手夏の学校開催報告

瑞慶覧 長空

- 48 【物性研究所セミナー】

編集後記



ゾル-ゲル変化を自ら繰り返す、アメーバのような新物質を人工的に合成

東京大学大学院工学系研究科 小野田 実真、吉田 亮
中性子科学研究施設 柴山 充弘

研究の背景

生物に着想を受けて開発された生体模倣材料は、私たちの生活の多くを支えています。蓮の葉の表面構造を模倣して得られる超撥水表面などはその一例です。しかし、生体模倣材料というと、生物の構造にならって材料設計する、いわゆる構造材料学的な着想がほとんどであり、生命現象を生み出す化学システムを材料に内包するような着想に由来するものは少ないことに気が付きます。

さて、自然界でみられる多様な生命現象は、高度に自己組織化された階層構造と、ミクロな構成要素のダイナミックな相互作用によって支えられていることが少なくありません。例えば、筋繊維を構成するアクチンという生体高分子は、集合と分散(重合と脱重合)を絶えず自律的に繰り返すことで筋収縮を起こし、生き物らしい「動き」を生み出しています。このアクチンによる集合-分散は、筋収縮だけでなく細胞運動・傷の修復などにおいて重要であるほか、アメーバのような原生動物の運動(ゾル-ゲル振動)においても極めて重要な役割を果たしています[1]。しかし、こう

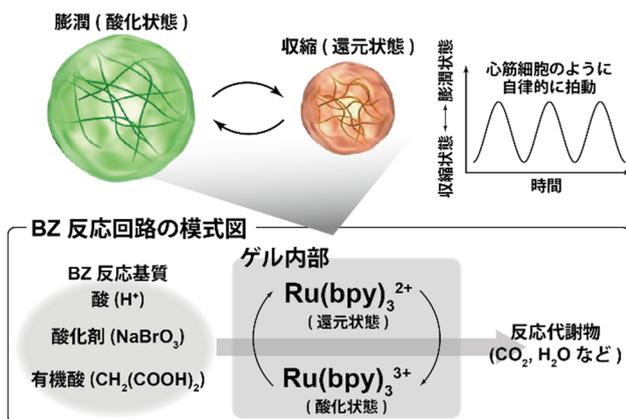


図1 自励振動ゲルのコンセプト図。BZ反応は生体内代謝回路の化学モデルとして知られ、その反応中、酸・酸化剤・還元剤を”代謝”しながらルテニウムビピリジン錯体(Ru(bpy)₃)の酸化・還元状態が自律的・周期的に振動する。自励振動ゲルは、ゲル内に化学的に結合されたRu(bpy)₃の酸化・還元変化をゲルの膨潤・収縮変化へと変換できるように設計されている。したがって、自励振動ゲルをBZ反応基質溶液に浸漬させると、BZ反応生起に伴う自律的な体積振動が観測される。

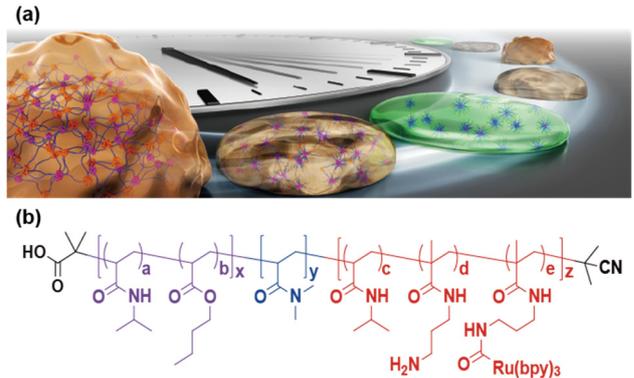


図2 (a)本研究のコンセプト図。時間軸(奥から手前)に沿ってゾル(緑色、高分子ミセルが分散)になったりゲル(橙色、高分子ミセルが連結)になったりする挙動を初めて実現した。(b)合成したABC型トリブロック共重合体の化学構造。

した「動き」を伴う生命の自律的な現象を人工模倣するのは一般に困難とされ、その実現に成功したという報告は殆ど無いのが現状でした。

一方、我々の研究グループは、温度応答性高分子であるPoly(*N*-isopropylacrylamide)と、化学振動反応であるBelousov-Zhabotinsky (BZ)反応の金属触媒(Ru(bpy)₃)を化学構造に組み込んで得られる自励振動ゲルが、BZ反応基質共存下、心筋細胞のように「動き」をもって自律的に拍動することを報告しています(図1)[2]。

こうした背景の下、今回我々は合成高分子のゾル化/ゲル化のメカニズムにBZ反応をカップリングさせることにより、アメーバの運動機構であるゾル-ゲル振動を自律的に引き起こす新物質の人工合成を目指しました[3](図2(a))。

分子設計指針

自律的なゾル-ゲル振動実現のため、我々は図2(b)に示すような温度応答性高分子(A)・親水性高分子(B)・自励振動高分子(C)からなるABC型トリブロック共重合体を設計しました。Aセグメントの下限臨界共溶温度(LCST, T_A)はCセグメントのLCST(T_C)より低くなるように設計されている($T_A < T_C$)ため、本高分子水溶液は温度の上昇と共にAセグメントの凝集とCセグメントの凝集が逐次的に起こります。その結果、ミセルの重なり合い濃度以上では、高分子ミセルネットワーク構造が効率よく形成され、温度可逆

が明確に生じました(図 4(b), 図 5(a))。更には、直径 5.0 mm の開管内にこの高分子溶液を導入したところ、ゾル-ゲル振動により溶液の運動性が周期的に変化することも分かりました(図 5(b))。

我々の知る限り、以上の結果は化学的に合成された材料により自律的なゾル-ゲル振動を実現した初めての報告です。特に興味深い点は、生体高分子であるアクチンの集合-分散を駆動力としてゾル-ゲル振動しているアメーバに倣い、合成高分子の集合-分散を駆動力としたゾル-ゲル振動が実現されたということです。本結果は、新たなバイオインスパイアード材料の創製を意味し、生き物のようなしなやかな動きを見せる新たなソフトロボットの実現への展開が強く期待されます。

謝辞

本研究は、上木岳士博士(物質・材料研究機構主任研究員)、玉手亮多博士(現・横浜国立大学工学研究員日本学術振興会特別研究員)との共同研究として行われました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] M. S. Bingley, *J. Exp. Biol.* **45**, 251 (1966).
- [2] R. Yoshida *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 5134 (1996).
- [3] M. Onoda *et al.*, *Nature Communications* **8**, 15862 (2017).



Ca₃ReO₅Cl₂の多色性

Ca₃ReO₅Cl₂の色は見る方向によって緑から茶色に変化し、さらに入射光の偏光により、信号機のように赤・黄・緑の3つの全く異なる色を示します(図2)。この物質は、陽イオンとして5d遷移金属元素のレニウム(Re⁶⁺)とカルシウム(Ca²⁺)を、陰イオンとして酸素(O²⁻)と塩素(Cl)を含みます。結晶構造の解析を行ったところ、Re⁶⁺の周りにはピラミッド型に5つの酸素が結合し、このピラミッドはCa²⁺と塩素とによってできたブロックで隔てられているような構造(図1b)をもつことがわかりました。

図2に示す透過率および吸光度のスペクトルを測定することで、色の違いをより詳細に知ることができます。図2aのように、結晶のbc面を見るとオレンジ色に、それ以外の方位から見ると緑色に見えますが、緑色に見える面も、ab面とac面では、微妙に色味が異なります。実際に、透過スペクトルも3つの面で、それぞれ異なります。オレンジ色に見えるbc面と緑色に見えるab、ac面のスペクトルの大きな違いは、緑色に対応する2.4 eV付近の光を透過するかしないかです。bc面ではこのエネルギーはほとんど透過せず、よりエネルギーの低い赤い光のみを透過するため、結晶はオレンジ色に見えます。2.4 eV付近のエネルギーを透過するため緑色に見えるab、ac面も2.0 eV以下の領域でスペクトルに違いがあり、やや結晶の色味が異なります。これらの色は、入射光に垂直な面内の2つの偏光(つまりbc面ではb偏光とc偏光)に対する吸収の足し合わせとなっており、偏光板で観察することで、それぞれの吸収を分離することができます。図2bに示すように、結晶の色はa偏光では緑、b偏光では赤、c偏光では黄色とまったく違う色を示し、これに対応して吸光度のスペクトルも異なります。a偏光は、1.4、1.9 eVと3.0 eVに吸収ピークが存在し、谷間の緑に対応する2.4 eVの光を透過します。一方、b、c偏光では2.4 eV以上に非常に強い連続的な吸収が存在し、それよりも低エネルギーで、b偏光では1.4 eVと2.3 eVに、c偏光では1.4 eVと1.9 eVに吸収ピークが存在します。この結果、b偏光では1.7 eVの赤い光、c偏光では2.1 eVの黄色い光を透過します。

観測された吸収ピークは、その吸収の強さやエネルギーから、どのような電子遷移に起因するかを推測することができます。遷移金属化合物の光吸収の起源は、占有されたd軌道から非占有のd軌道への遷移であるd-d遷移と配位子と遷移金属間の電荷移動遷移の2つが考えられます。一般に、Laporte 禁制である弱く鋭いd-d遷移と比べ、Laporte 許容である電荷移動遷移による光の吸収は、吸光

度が高くブロードです。このことから、b、c偏光で2.4 eV以上の、a偏光で3.0 eV以上にある連続的な強い吸収は、酸素の2p軌道とレニウムの5d軌道との間の電荷移動遷移に由来すると考えられます。一方、1.4、1.9、2.3 eVの3つのピークはd-d遷移と対応付けることができます。これらの電荷移動遷移とd-d遷移が可視光領域に存在し、光吸収に強い偏光依存性があることが、Ca₃ReO₅Cl₂が強い多色性を示す起源であることがわかりました。

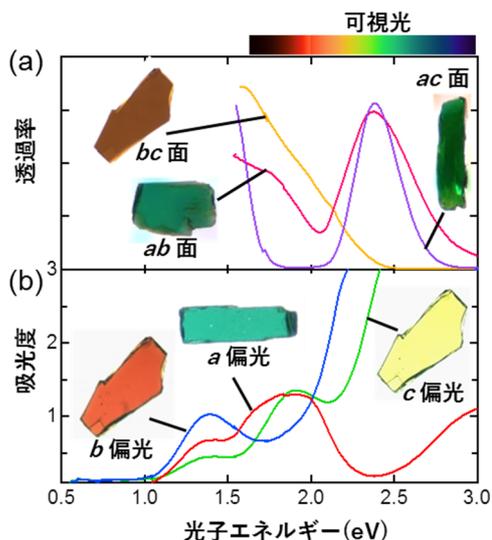


図2 Ca₃ReO₅Cl₂の透過率および吸光度のスペクトル
(a) Ca₃ReO₅Cl₂単結晶の可視光領域での透過率のスペクトル。ac、ab、bc面に垂直に光を入射させたスペクトルと実際の結晶の写真をそれぞれ示している。(b) a、b、c軸に平行な偏光をもつ入射光によって測定した吸光度のスペクトルと結晶の写真。1.0–3.0 eVの領域にレニウムの5d軌道のd-d遷移に対応したピーク構造が存在する。

多色性のメカニズム

このような光吸収の強い偏光依存性は、d-d遷移の光吸収の選択則を考えることで理解できます。そのために、まず第一原理計算によってレニウムの5d軌道の電子状態を調べました。その結果、図3の模式図に示すように、d電子が占有している最もエネルギーが低い軌道がd_{xy}軌道、そこからエネルギーの低い順に非占有のd_{xz-yz}、d_{xz+yz}、d_{z2}、d_{x2-y2}軌道という配列になっていることがわかりました。Ca₃ReO₅Cl₂中にはReサイトは1サイトしかなく、その局所的な対称性としてb軸に垂直な鏡映面を持ちます。Ca₃ReO₅Cl₂の多色性はReが担っているため、光学遷移の選択則はReサイトにおける偏光と5d軌道の対称性を考えることで理解できます。b軸に垂直な鏡映面に対してd軌道のパリティは図3に示すように、それぞれd_{xy}軌道(even)、d_{xz-yz}軌道(odd)、d_{xz+yz}軌道(even)、d_{z2}軌道(even)、

鉄系超伝導体 FeSe の硫黄置換における三次元圧力下電子相図

東京大学大学院新領域創成科学研究科 物質系専攻 松浦 康平、芝内 孝禎
物性研究所 物質設計評価施設 上床 美也

はじめに

鉄系超伝導体では、超伝導相の近傍において反強磁性相に加えて、 ab 面内異方性が生じた回転対称性の破れた電子状態(電子ネマティック相)が存在することが知られており、これらの揺らぎと超伝導の関係を明らかにすることが重要と考えられてきた[1]。この両者の秩序相は電子相図上でほぼ同じ領域で発現するため、個々の超伝導への影響を独立に評価することは困難であった。FeSe は鉄系超伝導体の中で最も簡単な結晶構造をしており、常圧では超伝導転移温度 $T_c = 9$ K であるが[2]、鉄系超伝導体で唯一、超伝導相の近傍で反強磁性相を伴わない電子ネマティック相が発現する[3]。そのため、電子ネマティック揺らぎ単独の超伝導に対する影響を研究するのに適した物質であると考えられた。

Se サイトの一部を等電荷元素である S で置換することにより、 T_c に大きな変化は見られないものの、非磁性の電子ネマティック転移温度 T_N は絶対零度まで抑制され、ネマティック量子臨界点の存在が報告されている[4]。一方で、物理的な加圧によって、S 置換系と同様に T_N は抑制されるが、ネマティック相が完全に消失する前に磁性相が誘起される。この圧力誘起の磁性相はドーム状の形状をしていて、高圧の領域で抑制されて、 $T_c = 38$ K に達する高温超伝導相が実現する[5]。このように、化学的圧力に相当する S 置換と、物理的な加圧では、非常に異なる電子相図を示すため、両者を独立変数として複合的に用いた場合、FeSe 系の基底状態がどのように変化するかを調べるのが重要と考えた。そこで、我々は蒸気輸送法で作製した FeSe の S 置換系 $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ の純良単結晶試料を用いた 10 GPa 級の高圧下輸送現象特性の測定を行い、FeSe の温度-圧力-S 置換量の三次元電子相図を確立した[6]。その結果、FeSe の圧力下電子相図の低圧領域では一部重なっていた電子ネマティック相と圧力誘起磁性相が S 置換量を増やすことで分離するような振る舞いを示した。さらに両秩序が消失した間の領域で、磁性相の近傍において新たな高温超伝導が観測された。以上の結果は、FeSe の三次元相図では圧力誘起磁性相が高温超伝導相と密接に関係することを示唆している。

実験結果

$\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ ($x=0.04, 0.08, 0.12, 0.17$) のすべての組成の試料は蒸気輸送法で合成した純良単結晶試料である。圧力下電気抵抗率測定は、定荷重型キュービックアンビル高圧装置を用いて系統的に行った。FeSe の圧力下電子相図の研究[5]と同様に、電気抵抗率の温度依存性に見られる異常から、電子ネマティック転移に相当する正方晶-直方晶構造相転移温度 T_N 、超伝導転移温度 T_c 、磁気相転移温度 T_m を決定し、それらの圧力依存性を調べた。その結果から図 1 に示す温度-圧力-S 置換の三次元電子相図を完成させた。S 置換とともに、電子ネマティック相は低圧側に抑制されるのに対し、磁性相は逆に高圧側にシフトしながら、観測される圧力領域が狭くなる変化を示した。磁性相の高圧側の高温超伝導は S 置換系においても磁性相近傍に発現しているが、低圧領域に着目すると、FeSe では一部重なっていた電子ネマティック相と磁性相が S 置換により分離しており、さらに分離した領域の磁性相の側に新たに高温超伝導が発現していることがわかる。

電子ネマティック相と磁性相の分離を検証するべく、大型放射光施設 SPring-8 でダイヤモンドアンビルセルを用いた高圧下における X 線回折実験を $x = 0.08$ の組成で行った。これまでに FeSe の圧力下における X 線回折実験により、圧力誘起磁性相は正方晶-直方晶構造相転移を伴っていることが報告されている[7]。この結果を考慮し、3 GPa と 4.9 GPa で(331)のブラックピークの温度依存性を測定した。その結果を図 2b、2c にそれぞれ示す。4.9 GPa では、電気抵抗測定で磁気転移による異常が観測された温度に近い領域で正方晶-直方晶構造相転移によるブラックピークの分離が観測された(図 2c)。一方で、電気抵抗測定で新たな高温超伝導が観測された 3 GPa では、そのような分離は見られず、最低温まで正方晶状態であることが明らかとなった(図 2b)。S 置換を施すことで、電子ネマティック相と磁性相が完全に分離し、正方晶の基底状態が実現することが明らかになった。

パラメーターが変化するから散乱角はどう蛇行したかで大きく変化する。すなわち、蛇行をポテンシャル散乱により増幅できる。これを、やはり狭い入射角の電子が通過できる QPC で収集する伝導経路を設定することで、伝導に ZB に依存する大きな揺らぎが現れる。試料は希釈冷凍機で冷却し、簡単な機構によって 7T までの磁場中で向きを回転できるようにしている。

3 実験結果と議論

Fig.1(b) の試料で QPC1 と QPC5 との間の伝導度 G_{1-5} を 2 次元面に平行な磁場 B_y の関数として様々な温度で示したのが Fig.2(a)である。冷却に伴い、細かな非周期的振動が現れ、その平均振幅は温度低下とともに大きくなる。この振動（ゆらぎ）は、一見ランダムなノイズのように思われるが、そうではなく、2 回独立した磁場掃引を行って測定すると Fig.2(b)のように、非常に良く再現するパターンが現れる。

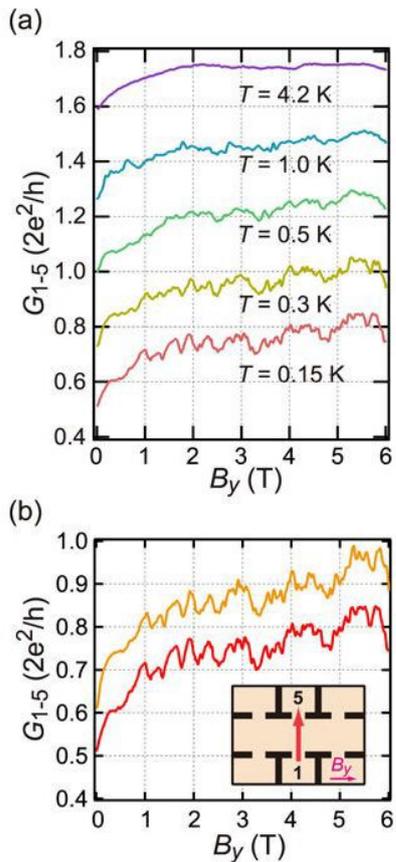


図 2 (a) QPC1 と 5 との間の電気伝導度 G_{1-5} を面内磁場 B_y の関数として測定した結果。縦軸の単位は量子化伝導度 $2e^2/h$ 。0.15K での結果から、0.2 ずつのオフセットを付けて示している。(b) 0.15K で、 G_{1-5} の磁場依存性を 2 回独立した測定をした結果。オフセットを付けて示している。

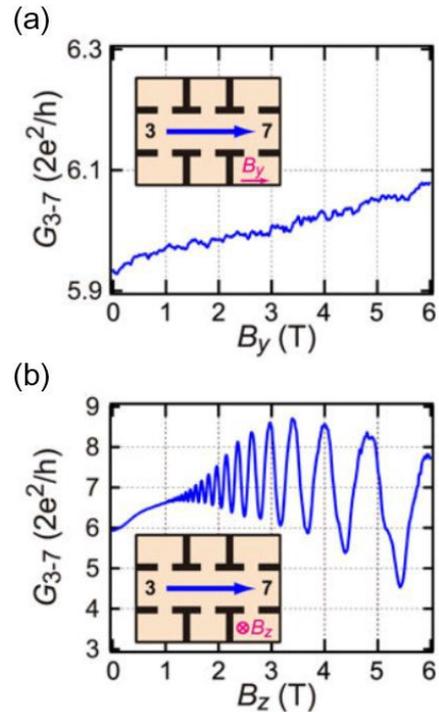


図 3 (a)QPC を介さない電極 3 と 7 の間の伝導度 G_{3-7} を面内磁場 B_y の関数として測定した結果。(b)(a)と同じ配置で 2 次元面に垂直な磁場の関数として測定した結果。

これは、メソスコピック伝導体にしばしば現れる普遍的伝導度ゆらぎ (universal conductance fluctuation, UCF) と共通する特徴である。が、もちろん、AB 位相の変化により量子干渉効果を通して現れる通常の UCF ではないことは、面内磁場であることから明らかである。更に決定的なのは、Fig.3 の測定で、QPC を通さない端子 3 と 7 の間の伝導測定では、全く同じ 2 次元電子ストリップ部分を測定しているにもかかわらず、面内磁場にはほとんど磁気伝導度がなく、面直磁場には SdH 振動が現れてしまった。すなわち、QPC 端子とそうでない端子との違い：1) スピン偏極電子の準弾道的伝導；2) 少数の伝導経路を選別的に測定していること、が明瞭な影響を生じるような現象でなくてはならず、通常の UCF でないことは明らかである。

「通常でない」UCF として、面内磁場である、というだけではスピン干渉による UCF を排除できない。すなわち、Rashba-SOI によって偏極電子スピンの決まった歳差運動をし、量子干渉しているという可能性である。が、これも、Fig.3 の実験ではほぼ否定される。更に、磁場を面内から面直に回しながらこのゆらぎのパターンを調べると、パターンは変化はするものの、フーリエ変換してみるとスペクトルがほとんど変わらない。スピンの量子干渉が

レーザー学会第 45 回定時総会レーザー学会奨励賞 を受賞して

小林研究室 中村 卓磨

2017年5月31日にレーザー学会第45回定時総会において、レーザー学会奨励賞を受賞致しました。対象となった発表はレーザー学会の第496回研究会において行った招待講演「MOM(磁気光学変調器)によるファイバーコム的高速制御」です。この奨励賞は、レーザーに関する研究できわめて示唆的かつ独創性、将来性のあるものに対して贈られる賞です。博士課程の最終年度にこのような賞により研究が評価されたということをついに嬉しく感じています。この受賞研究の遂行にあたり、ご協力いただきました関係者の皆さまに深く感謝申し上げます。

さて、本研究はレーザーの超精密制御の新しい方法を提案するものです[1]。今日において、レーザー発振周波数(即ち波長または光の色に相当するものですが)は人類が最も上手に制御できる物理量の一つになっています。例えば、300 THz($\text{THz}=10^{12}\text{ Hz}$)という発振周波数のレーザーを1 Hzを遥かに下回る精度で制御する、といった事が世界中の研究機関で行われています。これは光の周波数を15桁以上の精度で決定できる事に相当します。このレベルの測定は、私の知る限り、他の物理量において達成されていません。

では、こんなにも精密なレーザーを使うと何が出来るようになるのでしょうか?例えば“距離”の測定が非常に精密に出来るようになります。距離、すなわち“長さ”は現在、光速($299\,792\,458\text{ m/s}$)で定義されています。一方、レーザーの発振周波数($\text{Hz}=1/\text{s}$)は時間の逆数になります。周波数が正確であるという事は正確な時計を持っている事になり、それは正確に長さが測定できる事に繋がります。応用として、例えばGPSの精度向上に繋がります。超精密GPSを地面に埋め込むことで、微小な地殻変動を捉えることが出来るようになり、地震予知に繋がるのではないかと期待されています。また、光をそのまま用いる応用としては、宇宙の恒星の“色”を正確に測定できるようになります。正確には恒星の色の変化を精密に測定します。ある恒星と地球の位置関係は常に変動しています。すると、相対的な速度の変化により地球に届く恒星の色(光の周波数)が光のドップラー効果により変動します。仮に、地球の変動分を無視すると、恒星の色の変化は恒星の

動きを反映していることとなります。この動きの情報には、恒星の周りの惑星の重力による僅かな変動が含まれており、光の色を超精密に測定することで、惑星の数、位置、質量が分かるのです。例えば、あの星の周りには地球型惑星がある、というのがわかります。このような研究は将来、宇宙人の発見に繋がるかもしれません。

さて、話をレーザー開発に戻します。どうすれば、そんな超精密なレーザーが出来るのか?と聞きますと、実際は様々な要素が絡み合った複雑な問題です。しかし、その中の一番大きな要素の一つがレーザー共振器の長さを一定に保つ事です。レーザーというのは光の共振器(最も単純化すると二つの合わせ鏡)の中を光が何回も往復し続けます。往復し続けている光の一部が部分反射の鏡から取り出されてレーザー出力となっています。レーザーの共振器の中には“光の定在波”が出来る条件を満たす周波数の光のみが生き残り、他は光が往復する過程で淘汰されていきます。光の定在波の条件は共振器の長さで変わります。こういった理由でレーザーの発振周波数と共振器長は非常に密接に関わっています。

本研究ではこのレーザー共振器長を制御する新しい方法を開発しました。従来はどのような方法を用いていたか、と聞きますと、ミラーを張り付けたピエゾ素子というものを使っていました。ピエゾ素子というのは圧電素子とも呼ばれ、電圧をかけると伸び縮みするものです。つまり物理的にミラーを動かして、外部からの振動や音響ノイズをキャンセルすることで、共振器長を一定に保っていました。この方法は非常に有効で今日でも大半のレーザー安定化手法に用いられています。一方で、最先端の超高安定なレーザーに用いるのは物足りない事が多くなってきました。ピエゾ素子は物理的にミラーを動かすため、動作速度に限界があります。そのため、超音波領域($>20\text{ kHz}$)の外乱の制御が出来ず、これがレーザーの安定度を損ねていました。私の専門である“光周波数コム”という最先端レーザーにとってこれは致命的でした。この状況を改善したのが電気光学素子(EOM)の採用です。EOMは透明な素子で光を透過させて使用します。これに電圧をかけると素子の屈折率が僅かに変化します。光が感じる実効的な長さというのは、

USD10にて Young Researcher Poster Award を受賞

松田（巖）研究室 博士課程2年 伊藤 俊

この度、2017年6月11日~16日にドイツのInzellにて開催された超高速現象の国際会議 The 10th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics (USD10) にて、“Photo-induced ultrafast potential shift observed at a metal-semiconductor interface of a Bi thin film”という講演を行い、Young Researcher Poster Awardを受賞致しました。超短パルスレーザーを用いた物質表面での超高速ダイナミクス研究に特化した会議であり、フェムト秒(10^{-15} 秒)時間分解光電子分光・電子回折、テラヘルツ時間領域分光、そしてアト秒(10^{-18} 秒)パルス発生などの幅広いトピックで第一線の研究者が一同に会しました。若手研究者・学生を中心に約50件のポスター発表が行われ、その中から3名がAwardを受賞しました。

物質表面・界面に光を照射したときに電位(ポテンシャル)がシフトする現象は、光誘起起電力としてよく知られており、太陽電池やフォトダイオードなどの光エレクトロニクスデバイスを駆動する基本原理です。その基本的な機構は、光生成したキャリア対(電子・正孔ペア)が、表面・界面でのバンドベンディングに沿って空間分離することに基づき理解されてきました。実験的な検出にはもちろん電圧を直接測ることもできますが、物質に光を照射したときに放出される光電子を使うこともできます。光電子の放出過程ではエネルギーおよび運動量が保存されるため、光電子分光法は物質のバンド分散を直接取り出せる強力な手法です。光電子は物質表面の数原子層から放出されるため、基板に対するポテンシャル変化を、バンド分散がエネルギー方向へシフトする形で検出することができるのです。

さらに光としてパルス光を用いて、ポンプ光とプローブ光の2つのパルスの時間遅延を制御することで、起電力が時間的に変化する様子を取り出すこともできます。これまで、マイクロ秒(10^{-6} 秒)~ナノ秒(10^{-9} 秒)の時間スケールの起電力ダイナミクスが盛んに観測され、キャリアが熱的に拡散する過程やトンネリングする過程に基づき理解されてきました。しかし、さらに速いフェムト秒~ピコ秒(10^{-12} 秒)スケールの起電力ダイナミクスが調べられるよ

うになったのはつい最近であり [1]、未解明の領域です。とくに、バンドベンディング領域でのキャリアの空間分離と起電力の変化が同じ時間スケールで起きてしまうため、従来のシンプルな描像が適用できるかは非自明であり、この時間スケールでの起電力の存在を疑問視する意見もありました。

本研究では、ゲルマニウム(Ge)基板上に成長させたビスマス(Bi)薄膜の金属-半導体接合のバンドベンディング領域において、フェムト秒からピコ秒の時間スケールで起電力が生成・緩和する様子を捉えました。このような超高速の時間スケールでポテンシャルが変化すると、検出器へ飛行中の光電子がダイナミカルに加速(減速)されることが予想されており [2]、その特異な時間構造を捉えることで起電力の変化が起きていることを確認しました。さらに、起電力の時間変化が、光電子スペクトルの経時的な変化におよぼす影響を明らかにしました。また、キャリアの空間分離をその初期過程から考えた場合、従来の描像においても、このような超高速の時間スケールで起電力が生じうることを示しました。これらの結果は、物質表面・界面での起電力ダイナミクスの理解をより速いスケールまで拡張していく第一歩になると考えております。現在、議論の精密化を行って、この時間スケールでの起電力ダイナミクスの包括的な理解を目指しています。

また最近私たちは、高分解能光電子分光測定と量子干渉効果を組み合わせた独自の測定によって、Biが近年注目を集めるトポロジカル物質であることを解明しました [3]。トポロジカル物質の表面では無磁場下でもスピン偏極した電子状態が存在し、スピンを情報伝達に用いた次世代デバイスへの応用が活発に研究されています。とくに最近では、トポロジカル絶縁体表面での光起電力を利用した新しい素子の提案がなされており [4]、トポロジカル物質と光起電力の結合はより重要なトピックになっていくと予想されます。

少し余談になりますが、今回の会議は合計200名程度の参加者が合宿場に宿泊する形式であったため、セッション

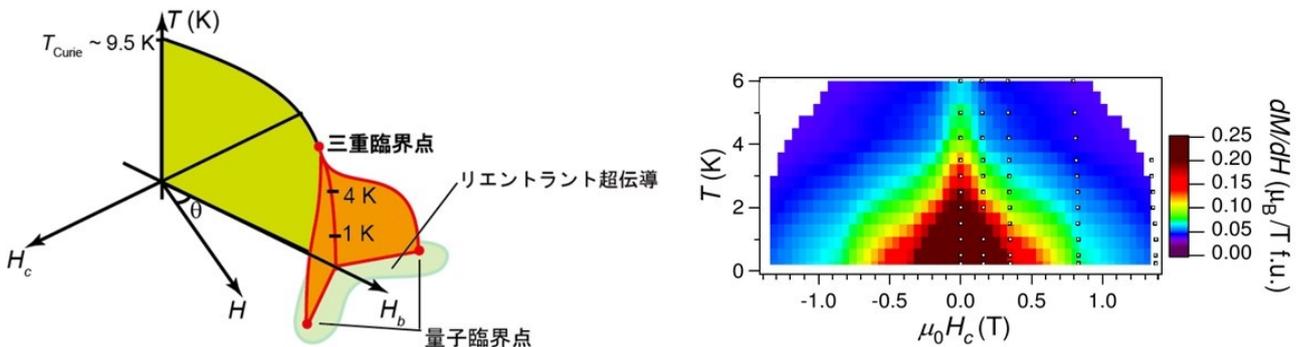
国際会議 Actinides2017 において Student poster award を受賞して

凝縮系物性研究部門 榊原研究室 中村 翔太

この度、2017年7月9日～14日に東北大学百周年記念会館川内萩ホールにて開催された国際会議 Actinides2017で、私は“Magnetization Study on the Ising Ferromagnet URhGe with High-Precision Angle-Resolved Magnetic Field near the Hard Axis”というタイトルで発表を行い、Student poster award を受賞しました。本賞は、学生によるポスター発表の中で最も優れた3件に贈られました。以下に、受賞対象となった研究内容を簡単に説明します。

本研究の対象である URhGe は、強磁性と超伝導の二つの状態が一つの物質内で発現する物質です。この物質の b 軸方向から 5 度以内の狭い角度範囲に磁場をかけると、超伝導が一度壊れてしまいますが、さらに強い磁場かけると再び出現するという、磁場による特異な超伝導増強現象 (リエントラント超伝導) が見つかっています。しかしながら、その現象のメカニズムは未だ良く分かっていません[1,2]。一方、磁気スピンの一次相転移[3]が、これと同様の狭い磁場角度範囲で起こる[4]ことが知られています。この相転移の起点である三重臨界点近傍の強磁性揺らぎがリエントラント超伝導のカギを握っている[5]と言われており、これまで盛んに三重臨界点の研究が試みられてきました。しかし、URhGe の強い磁気異方性により三重臨界点の正確な位置の決定は非常に困難でした。

そこで、我々は極低温・高磁場下で試料の角度を 0.01 度の精度で制御できる 2 軸回転機構を備えた磁化測定装置を開発し、磁化から URhGe の三重臨界点を捉え、三次元相図の作成に成功しました(図左)。得られた相図から三重臨界点はこれまで予想されたよりも超伝導状態から離れた高温にあることがわかり、この結果は三重臨界点近傍の揺らぎがリエントラント超伝導に届かない可能性を示唆しています。また今回、三次元相図上で三重臨界点を起点とした特徴的な一次相転移面(ウィング構造)を捉えました。ウィング構造の形状は今までよく分かっていませんでしたが、今回我々はその詳細な形状を実験から初めて明らかにしました(図右)。本研究で測定した磁化は強磁性量子相転移の理論に結び付けられる熱力学量であり、磁化から三次元相図の作成に成功した今回の結果は、磁場と超伝導増強の関係性を明らかにするための重要な成果と言えます。また、本研究で開発した装置によって強い異方性のある系の研究の更なる進展が期待されます。本研究成果をまとめた論文は文献[6]に掲載されており、この論文は同誌で高く評価されて Editors' Suggestion に選ばれました。

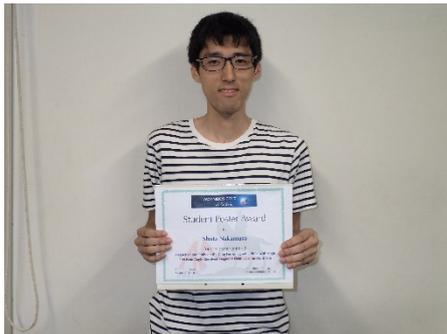


(左) URhGe の三次元相図。オレンジ色の面上で磁気スピンの一次相転移が起こる。三重臨界点はその一次相転移が起こる面の起点となっており、4 K 以上の高温にあるのに対して、特異な超伝導(リエントラント超伝導)は高磁場(~12 T)下かつ 0.5 K 以下の低温で起こる。(右) 磁化から捉えた、 H_c - T 面上に投影した Wing 構造(臨界磁場における dM/dH の強度の Contour Plot)。この図から三重臨界点が 4 K 以上にあるのは明らかである。

最後に、本研究を行うにあたって多大なご協力を頂きました物性研究所凝縮系物性研究部門の榊原俊郎教授と橘高俊一郎助教、東北大学金属材料研究所の清水悠晴助教(元物性研 PD)にこの場を借りて深く感謝申し上げます。また、本研究は日本原子力研究開発機構(JAEA)との共同研究です。

参考文献

- [1] F. Lévy *et al.*, *Science* **309**, 1343 (2005).
- [2] D. Aoki *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 061011 (2014).
- [3] F. Hardy *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 195107 (2011).
- [4] F. Lévy *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 164211 (2009).
- [5] Y. Tokunaga *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 216401 (2015).
- [6] S. Nakamura *et al.*, *Phys. Rev. B* **96**, 094411 (2017).



国際会議 International Conference on Inelastic X-ray scattering (IXS2017)にて“POSTER PRIZE”を受賞して

和達研究室 博士課程3年 横山 優一

ドイツ・ハンブルクの放射光施設 DESY で開催された国際会議 International Conference on Inelastic X-ray scattering (IXS2017)にて、“POSTER PRIZE”を受賞する栄誉に恵まれました。IXSはX線の非弾性散乱を用いた研究に特化した会議で、今回で10回目の開催になります。近年分解能の向上が著しい軟X線領域の共鳴発光分光に加え、硬X線を用いた発光分光やコンプトン散乱などによる最前線の研究成果の発表が相次ぎました。また、立ち上がったばかりのX線自由電子レーザーEuropean XFELの見学もあり、非弾性散乱分野でも超高速時間分解測定の実現が間近に迫っていることを実感しました。

受賞対象となった発表は“Epitaxial strain induced spin states of LaCoO₃ thin films clarified by resonant inelastic soft x-ray scattering”です。この研究は、スピン状態の自由度が特徴的な遷移金属酸化物を対象に、外的な刺激(特に歪み)との関係を明らかにしたいという思いから始めました。研究遂行にあたり、大型放射光施設 SPring-8 の東京大学ビームライン BL07LSU に所属する方々を中心に多くの共同研究者の方々に大変お世話になりました。試料につきましては、東京大学・工学系研究科の十倉先生、川崎先生、中村先生、藤岡先生から提供していただきました。物質・材料研究機構の山崎先生と指導教員の和達先生には、研究の構想段階から相談させていただき、研究全体を通じてご指導いただきました。物性研究所の原田先生と宮脇さんには超高分解能発光分光装置 HORNET を用いた実験と解析についてご指導いただきました。奈良先端大の大門先生、田口先生には理論計算で大変お世話になりました。産業技術総合研究所の朝倉先生、和達研究室の平田さん、田久保さん、山本航平さんには何度も議論させていただきました。本研究は共同研究者の皆様の貢献があって初めて成し遂げることができました。この場を借りて深く感謝申し上げます。

研究内容につきましても簡単に紹介させていただきます。 $3d$ 遷移金属酸化物では強い電子相関によって電子・スピン・軌道に自由度が生まれ多彩な物性を示すことが特徴的です。中でもコバルトを含む LaCoO₃ ではスピン状態が温度変化などの外的な刺激によって変化することが知られて

おります。そこで、私は、身近なものでありながら実はまだよく分かっていない歪みとの関係に注目してスピン状態の変化を調べました。実験では、高輝度の放射光X線を用いて、共鳴軟 X 線非弾性散乱(RIXS)を行いました。この手法では、 dd 励起 (非弾性散乱にみられるコバルト $3d$ 電子間の遷移)からスピン状態を明らかにすることができ、従来のX線吸収分光法よりも精度の高い測定が可能です。RIXS の実験により、X 線吸収分光法では捉えられなかった歪みによるスピン状態の変化を観測することに成功しました。さらに理論計算と組み合わせることで、歪みの大きさとスピン状態の関係を定量的に求めることを行いました。その結果、約 1%の引っ張り歪みによって、歪みの無いバルク試料では低スピンであったものが全て高スピンの状態を見出しました。加えて、その高スピン状態は歪んでいない O_h 対称性の高スピンと歪んだ D_{2h} 対称性の高スピンが 1:1 の割合で共存していることを明らかにしました。

コバルトをはじめ様々な $3d$ 遷移金属を含む化合物を対象に、未だ明らかになっていない複雑な電子状態を解明する研究を今後も続けていきたいと考えております。

【関連論文】

“Tensile-Strain Dependent Spin States in Epitaxial LaCoO₃ Thin Films”, Y. Yokoyama, Y. Yamasaki, M. Taguchi, Y. Hirata, K. Takubo, J. Miyawaki, Y. Harada, D. Asakura, J. Fujioka, M. Nakamura, H. Daimon, M. Kawasaki, Y. Tokura, and H. Wadati, arXiv:1708.07529 [cond-mat.str-el].

J-Physics 国際会議において“Best Poster Award” を受賞して

瀧川研究室 博士課程3年 谷口 貴紀

この度、八幡平で行われた J-Physics 国際会議にて “Best Poster Award”を受賞する機会に恵まれました。受賞対象となった研究題目は、“The observation of the field induced transition in PrTi₂Al₂₀”です。J-Physics は多極子伝導系の物理に関する新学術領域であり、本会議は J-Physics が主催した国際会議です。本研究を行うにあたり、たくさんの共同研究者の方々にお世話になりました。まず、辻本真規様、永岡靖浩様、酒井明人様、松本洋介様、中辻知先生に非常に純度の高い単結晶試料を提供して頂きました。磁化測定では、中村翔太様、榊原俊郎先生に大変お世話になりました。理論では、首都大学東京の服部一匡准教授に懇切丁寧に教えて頂きました。この研究は、共同研究者の方々の貢献がどれひとつ欠けても成し遂げられませんでした。共同研究者の皆様に、この場をお借りして深く感謝申し上げます。以下に本研究について簡単に述べさせていただきます。

重い電子系において、反強磁性スピン揺らぎの枠組みにおいて、量子臨界現象の定性的な理解が進んでいます。この系は、伝導電子を介した反強的な局在磁気双極子間相互作用 (RKKY 相互作用) と双極子を伝導電子が遮蔽する相互作用 (近藤効果) が競合しています。両者の競合が起源で、多様な長距離秩序、重い電子状態、非フェルミ液体状態、重い電子超伝導状態などが引き起こされます。一方、*f* 電子は大きな角運動量を持つので、ある条件が揃えば磁気双極子よりも高次のテンソルである多極子モーメントの物性が現れることが知られています。それでは、スピン(双極子)の次に高次である四極子は、重い電子系の局在スピンの置き換えることはできるのでしょうか。これは、実は理論的にも実験的にも未だ未解明の興味深い問題です。この問いの答えとして重要となるのは、伝導電子を介した四極子間相互作用の理解です。従来の四極子に関する実験的研究では、CeB₆ のように磁気双極子の自由度を持つため、ハミルトニアンが複雑になることが問題でした。2010 年以降、物質開発の進展により、*4f*² 配置を取る非クラマース系 Pr₁₋₂-20 系において、非磁性で四極子秩序状態を持つ物質群が見出されました。特に PrTi₂Al₂₀ はこの物質群で唯一の強四極子秩序相が発現しているため、シンプルな四極子間相互作用を研究する上で非常に適した系です。

このような背景から、私たちは四極子間相互作用と磁場との関係と多重極環境でマイクロに四極子を検出手法の開発を目指しました。そこで私たちは局所磁場・電場勾配を通して微視的に電子の状態を観測することのできる核磁気共鳴法(NMR)に注目しました。PrTi₂Al₂₀は、Prの周りをAlの籠が囲っている構造です。四極子転移によってPrの4*f*電子が作る局所磁場・電場勾配もその対称性に従って変化するので、周りのAlサイトのNMRはPrの4*f*電子の四極子秩序検出の強力なプローブになると私たちは考えました。

磁場を<111>方向に印加した場合、結晶構造に由来する3回回転対称性の破れの微視的観測に成功しました。さらに、磁場を<100>方向に印加すると、これまで単一相と考えられてきた四極子秩序相内で磁場誘起相転移を発見しました。この磁場誘起相転移の起源は、磁場に依存した四極子間相互作用と Zeeman 相互作用の競合です。これまでは、四極子間相互作用に磁場の影響は考えられてこなかったのですが、今回、初めてその存在と重要性が明らかになりました。

以上が受賞対象となった研究の概要です。今後は新たな理論モデルの検証と、その理論から導かれる四極子間相互作用における伝導電子の役割を理解することが重要と考えられます。また、高圧における重い電子超伝導相と PrV₂Al₂₀ の測定も行う予定で、伝導電子と四極子が奏でる豊かな物理の発見が期待されます。最後になりますが、一から私に物理を指南して下さいました指導教官の瀧川先生に御礼を申し上げます。



授賞式の様子

受賞紹介ホームページ

<http://www.springer.com/chemistry/polymer+science/journal/396/PSE%3FdetailsPage=societies>

参考文献

1. Sakai, T.; Matsunaga, T.; Yamamoto, Y.; Ito, C.; Yoshida, R.; Suzuki, S.; Sasaki, N.; Shibayama, M.; Chung, U., *Macromolecules* **2008**, *41* (14), 5379-5384.
2. Matsunaga, T.; Sakai, T.; Akagi, Y.; Chung, U.; Shibayama, M., *Macromolecules* **2009**, *42*, 1344-1351.
3. Shibayama, M.; Li, X.; Sakai, T., *Ind. Eng. Chem. Res.* **2018**, *57*, 1121-1128.
4. Li, X.; Hirosawa, K.; Sakai, T.; Gilbert, E. P.; Shibayama, M., *Macromolecules* **2017**, *50*, 3655-3661.
5. Hayashi, K.; Okamoto, F.; Hoshi, S.; Katashima, T.; Zujur, D. C.; Li, X.; Shibayama, M.; Gilbert, E. P.; Chung, U.; Ohba, S.; Oshika, T.; Sakai, T., *Nat. Biomed. Eng.* **2017**, *1*, 0044(1)-0044(7).



外国人客員所員を経験して

Report upon the completion of my Visiting Professorship at ISSP

I, Akira OTSUKI, spent 3 month from the 1st of June to the 31st of August as a visiting professor at the Institute for Solid State Physics (ISSP) at the Kashiwa campus of The University of Tokyo. I was kindly hosted by the group of Prof. Shibayama in the Neutron Science Laboratory. My stay was focusing on the measurement of concentrated colloidal particle suspensions by the scattering method newly developed by his group. Accurate evaluation of dispersion/coagulation in such concentrated suspensions/dispersions is quite important since many of the existing methods require a dilute suspension and could overlook the potential coagulation that may depress the industrial processes dealing those suspensions [e.g. 1]. In a general sense, I have been very interested in the correlation between the chemical/physical environments and the changes in the microscopic particle-particle interaction and macroscopic behavior of suspensions [e.g. 2].

It was very honored for me to visit Prof. Shibayama's group and interact with many of the leading and young scientists at ISSP. I was particularly fond of the instantaneous responses to the necessary actions taken by Prof. Shibayama, Dr. Li, and other members of ISSP in order to enhance our collaborative research activities and address administrative issues. Such quick responses are quite unique and rare around the world. I wish I could stay a little longer to complete the bulk of my work. Also, I would like to acknowledge my appreciations to those students and academics who helped me a lot in terms of conducting experiments and other small things. Some of them work until so late that I never see that situation after I left Japan, except myself. I wish they have a very good success in their research and future, and really hope to see them again.

It was also a pleasure to join some casual dinners during my stay at Kashiwa and Tokai. They were good chances for me and my wife to communicate and know many people within the institute. I wish to acknowledge my thanks to the organizers of those occasions.

Thank you again for the kind help from the members of ISSP during my visit. I look forward to working with Prof. Shibayama and the other colleagues of ISSP in the near future through collaborative research schemes, such as bilateral research program, European project, student/staff exchange program. I have a full list of those opportunities. Should you have any queries about the potential collaborations, I am very happy to hear from you.

Best regards,

Akira Otsuki, PhD

Maître de conférences / associate professor

Ecole Nationale Supérieure de Géologie

Université de Lorraine

Campus Brabois, Bat A

2 rue du Doyen Marcel Roubault, BP10162

F-54505 VANDOEUVRE-LES-NANCY Cedex - FRANCE

E-mail: akira.otsuki@univ-lorraine.fr

Tel: +33 3 72 74 45 43



References:

- [1] Akira Otsuki*, Gary Bryant, 2015. Characterization of the interactions within fine particle mixture in highly concentrated suspensions for advanced particle processing , *Advances in Colloid and Interface Science*, 226, 37-43.
- [2] Akira Otsuki*, 2018. Coupling colloidal forces with yield stress of charged inorganic particle suspension: a review, *Electrophoresis*, 39, 690-701.



展示ガイド

オススメ順路

スタート(受付)

光とレーザー

世界一の超強磁場

メイン会場

ゴール・景品交換所

A棟1階

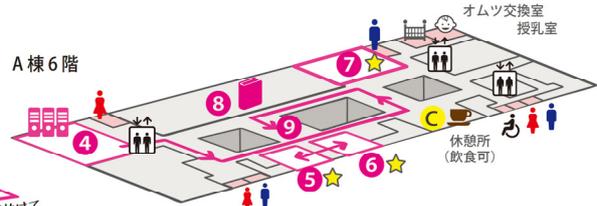
1 D棟

2 C棟

3 K棟

4~8 A棟6階

9 A棟6階



イベント案内

A ガイドツアー

10/27 (金) 15:00~
10/28 (土) 11:00~13:30、15:00~
A棟1階中庭(受付裏)、5分前集合
物性研究所のスタッフがみどころや
最先端研究の現場をガイドします。
研究者と話してみたい、子供と一緒に
楽しみたい、建物の中で迷いそう
...という方、ぜひどうぞ。

B 公開実験クイズ

10/27 (金) 14:30~
10/28 (土) 10:30~14:30
A棟1階受付横
怪盗マテリアルが今年も出現!
クイズに答えて宝物を取り戻せ!
全問正解で、「モノ」知り博士。

C サイエンス・カフェ

10/28 (土) 12:30~
A棟6階ラウンジ
話題提供: 松田康弘准教授
様々な困難を乗り越え、極限的な
強磁場に挑戦することで、ようやく
知ることができる物質の隠れた
性質。その魅力について紹介します。

クイズラリー

★マークの展示でクイズに挑戦。
正解スタンプを4個以上集めた方に、
物性研オリジナルグッズを
プレゼント! ※配布数に限りがあります。

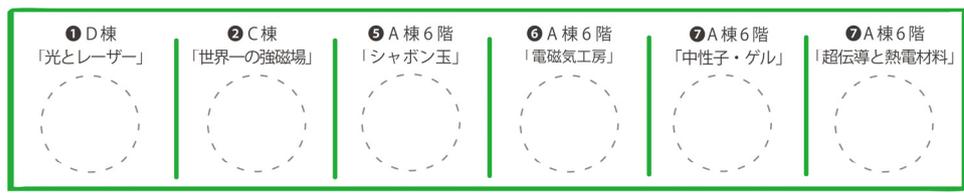


図1 物性研ガイドマップ

このガイドマップを用いて、企画を簡単にご紹介します。
今回は、恒例のガイドツアー、公開実験クイズ、サイエ
ンスカフェの3つのイベントと10の展示が行われました。
展示の詳細については、以下のガイドツアーでご紹介しま
す。また、マップに星印が付いた展示場所でクイズに答
えてスタンプを4つ以上集めると、物性研のオリジナルグ
ッズ(クリアマイボトル、8way マルチツール、動物貯金箱
のいずれか)がもらえるという、クイズラリーも開催され
ました。これまでは単なるスタンプラリーだったのですが、
展示の中身をより深く知って頂くためクイズと組み合わ
せたのです。なお、企画やクイズラリーは益田隆嗣委員が
取りまとめを担当しました。

企画の一番目であるガイドツアーのちらしが図2です。
ツアーのガイドは基本的に所員や助教が務めます。専門
的な説明も交えながら、効率よく企画を見て廻ってもら
うという狙いです。今回は、廣井善二副委員長がとりまと
めを行い、図2のちらしに示された3つのコースが設定され
ました。ガイドツアーは2日間で4回あるので、その気にな
れば全コースを見て廻ることもできます。

物性研究所 一般公開 ガイドツアー2017

ようこそ東京大学物性研究所へ。
物性研究所のスタッフが最先端の研究現場へご案内いたします。

開始時刻: 10月27日(金) 15:00 (各1時間程度)
10月28日(土) 11:00, 13:30, 15:00

集合場所: 物性研究所A棟 1階受付裏



※①等の数字は、各企画の部屋番号に対応しています(物性研リーフレットを参照)

図2 ガイドツアーのちらし

1 つ目のコースは物性研が誇る大型実験施設を見て廻るコース、2 つ目は普段から高度な装置を駆使して物性測定を行っている研究室が企画したコース、3 つ目は物質合成と理論の研究室が企画したコースです。開始時間の前にコース名を書いた旗の下に参加者が集まるのですが、人気の高いコースもイマイチのコース(どことは言いませんが)もあり、コース作りの難しさを実感しました。行った先の展示会場での説明はたいへん良かったようで、「分かりやすかった」、「楽しかった」というアンケート回答を多数頂きました。実は、ガイドツアーのスタートは次に述べる公開実験クイズの終了時間と合わせてあるのですが、時間調整がうまくいかない回もあったようで、これも今後の検討事項だと思います。

第2の企画である公開実験クイズは、数年前から鈴木博之 URA が始めた企画で、怪盗マテリアルと探偵サイエンスに扮した学生(今回は手伝いの黒子も登場)がお芝居をしながら、物性研の展示に関係した三択クイズを出題します。来場者は挙手で解答し(記録用紙にも記入します)、その解答はすべて実験で示されるという、たいへん手の込んだ企画です。ときどき実験が失敗するというご愛敬もあって、それがかえって来場者にうけたりします。公開実験クイズの様子を示したのが図3の2枚の写真です。怪盗マテリアルはディスプレイに映っていますが、実は彼は就職活動のため、初日はビデオ参加になっていたのです。全問正解者には物性研博士の認定証が贈られました。なお、この企画には、国際交流室の皆様にもお手伝い頂きました。

3 つ目の企画はサイエンス・カフェです。この企画は、6 階のラウンジで飲み物を飲みながら(もちろん無料です。すぐに無くなっちゃいましたが...)、物性研の所員が一般向けにかみ砕いた最先端の科学のお話をすると言うものです。



図3 公開実験クイズの様子

今年は図3のちらしのように国際超強磁場科学研究施設の松田康弘所員が「超強磁場のすすめ」というタイトルでお話をされました。会場は椅子が足りなくて追加するぐらい満員で、お子様から年配の方まで幅広い方々が来場されました。強磁場は相対論と深いつながりがあるという話や磁場が強すぎて磁石が壊れてしまうので(0.000001 秒とかの世界です)、壊れる前に測定を済ませてしまうと言う話に、聴衆の皆さんは大いに感心していました。私はこの企画の司会をしていたのですが、質問が出すぎで終わらせるのがたいへんでした。高度な知識をお持ちの方からの質問もあり、松田先生がタジタジになる場面もあるほどでした。その様子を納めた写真が図5です。熱気が伝わってきますね。

物性研究所 サイエンス・カフェ によろこそ!

おいしいコーヒー
お菓子付き!
(無料)

日時:平成29年10月28日(土)12:30~
場所:物性研究所A棟6階ラウンジ
話題提供:松田康弘(物性研究所・准教授)

「超強磁場のすすめ」



自然は磁場を嫌う傾向があり、強い磁場をつくるには様々な工夫を要する。しかし、敢えて極限的な強磁場に挑戦することで物質の隠れた性質を知ることができる。その魅力について紹介する。

図4 サイエンス・カフェのちらし

物性研の一般公開とは少し離れるのですが、今回、柏キャンパス全体の特別講演会で、計算物質科学研究センターの渡辺宙志助教が講演を行いました。講演のタイトルは、「スパコンでできること、できないこと」です。ほとんどの一般の方は、ニュースなどでも聞くスパコン(スーパーコンピュータ)の何がスーパーなのかはご存じないと思いますが、渡辺さんはそこからスタートして、ご自分の研究である流体中の気泡成長の話、さらには数学パズルとして有名な数独の話をされました(彼は数独の世界では有名人です)。堂々とした話しぶりで、聴衆の皆様から大きな拍手を受けていました。その様子を示したのが図9です。



図9 特別講演会の様子

もう一つの番外編ですが、一般公開に合わせて、リケジョイベント「未来をのぞこう！」が開催されました。この企画は、森初果所員が中心となって毎年行っているもので、今回は52名の女子中高生、およびその保護者が参加しました。瀧川所長や先輩リケジョのお話を聞く以外に、一般公開の展示を見て廻ったり、大学院生と一緒にランチを食べて研究の話の聞いたりして、とても楽しんで頂いたという話を聞いています。図10の写真は、一般公開の展示会場(電磁気工房)での一コマです。楽しそうですね。



図10 リケジョイベントの中の一コマ(電磁気工房にて)

運営のことをもう少し書かせていただきます。池田暁彦委員は公開実験クイズの実験装置の作成以外に、みんなの活力の元になるお弁当の手配を担当しました。山崎淳委員には餅田円委員と協力して、会場の案内ポスターを作成しました。物性研の会場は低層棟実験室から本館の6階までとても広いので、ポスターの枚数も多く、いったいどうすれば来場者の方々にスムーズに見て廻って頂けるかは大きなテーマです。さらに今回は、道案内のボランティアの学生さんの数も増やしました。学生さんたちには1人あたり2時間、ポイントになる場所に立って、道案内と質問の受け答えをして頂きました。どうもありがとうございました。

今回行った大きな変更の一つはアンケートです。一般公開のようなイベントにおいて来場者の皆様にご満足頂けるようにするためには、アンケートはたいへん重要です。これまでは紙媒体のアンケートだったため、集計作業に時間もお金もかかってたいへんでした。そこで今回、総務係の山本佳奈係員の提案とご努力で、Google Formによるアンケートを行いました。これだと、集計が一瞬でできるので、はるかに効率が良いです。スマートフォンでQRコードを読み取り入力・送信するのが基本ですが、スマホ無しでも入力できるように、6階にアンケート入力コーナーを設置しました。タブレットと入力補助の人員を配置してあります。もちろん、電子媒体は苦手という方のために紙媒体のアンケートも用意してあります。予想通り、回答率が少し(前回の31%から22%に)下がりましたが、この方式が浸透すれば回答率は元に戻るでしょうし、何と言っても集計の正確さと早さがあるので、今後もこの方式を続けたいと思っています。アンケート入力コーナーとともに、景品の受けとり場所(これまでは受付で行っていた)も一緒に6階に移動しました。つまり、ガイドマップの⑨の場所が見学のゴールになったわけです。1階を受付だけにしたことで、

混雑が緩和され、人の流れ(6階への誘導)もはるかに良くなりました。

最後に、全体を見渡していつも適切な助言をして頂いた矢作直之委員、一般公開の実際的な運営を私と一緒にして頂いた大島潤二委員と総務係の山本佳奈係員、岩村ときわ前委員、会計をしっかりと管理して頂いた鈴木貴博委員、準備や当日の数限りない細かい仕事を積極的にして頂いた総務係の矢口隆紀係長と竹山牧子主任はじめとする事務の皆様、研究室の秘書の皆様に心から感謝申し上げます。平成30年度の一般公開は廣井善二委員長を中心に行われます。成功することをお祈りしています。

物性研究所短期研究会

物性研スパコン共同利用CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」の報告

日時：2016年4月4日(月)13:20~5日(火)17:20

場所：東京大学物性研究所 6階大講義室

物性研究所スーパーコンピュータ共同利用・
計算物質科学研究センター
合同研究会「計算物質科学の今と未来」

COMPUTATIONAL
MATERIALS SCIENCE
— Now and the Future —

ISSP JOINT-USE
SUPERCOMPUTER/
CCMS SYMPOSIUM

2016年4月4日(月)~5日(火)
東京大学物性研究所 6階大講義室

主催：東京大学物性研究所共催：計算物質科学研究センター(CCMS)

世話人代表：杉野修

組織委員：川島 直輝 (物性研 教授)、野口 博司 (物性研 准教授)、渡辺 宙志 (物性研 助教)、笠松 秀輔 (物性研 助教)、野口 良史 (物性研 助教)、小田 竜樹 (金沢大 教授)、吉本 芳英 (東京大 准教授)、川村 光 (大阪大 教授)、岡本 祐幸 (名古屋大 教授)、求 幸年 (東京大 准教授)、川上 養一 (京大 教授)

平成 27 年度の物性研スパコン共同利用果報告会が 2016 年 4 月 4 日(月)から 5 日(火)の二日間にわたって行われた。この研究会は全国の物性研スパコン利用者が集い最新の成果を報告する会合であり、毎年開催されているものである。従来、この研究会は年末年始ごろに行われてきたが、今回は年度が明けてすぐの 4 月初めに開催された。この時期は授業や研究プロジェクトの会合などが始まる前の時期ということで、参加しやすいと好評であった。実際、口頭発表 17 件、ポスター発表 22 件、参加者 134 名(2 日間の延べ人数)と参加者の増加が見られた。今回は通常の報告会に加え、HPCI 戦略プログラム(「京」コンピュータのプロジェクト)の受け皿機関として設立した計算物質科学研究センター(CCMS)の 5 年間の活動を振り返るための企画として開催された。そのため CCMS 関連の講演に重きを置いて企画した。なお、その企画は次の重点課題(ポスト「京」コンピュータに向けてのプロジェクト)に向けてのスタートアップとして位置付けられる。

本研究会での特別講演者は理化学研究所の藤田航平氏であり、「京」全系を使った都市地震シミュレーションに関する研究紹介があった。東京の 10 km × 10 km の領域の都市地震シミュレーションを可能にするために行った非構造格子陰の時間積分有限要素法に基づくアプリ開発の事例が紹介された。特別講演(1 件)の他に招待講演が 16 件行われた。これは CCMS 関連の講演 7 件を含む。招待講演では、物性研スパコンや「京」コンピュータを用いた大規模アプリ開発とそれを用いた物質科学研究の進展に関して、東京大学の赤井久純氏(非平衡 KKR グリーン関数法)、野口良史氏(多体グリーン関数法)、常行真司氏(熱伝導計算手法)、藤堂眞治氏(確率的最適化法)、大塚孝弘氏(変分

モンテカルロ法)、尾崎泰助氏(OpenMX 開発)、押山淳氏(実空間 DFT 計算法)、小沢遼氏(多項式展開法)による講演が行われた。学外からは、大阪大学の石河孝洋氏(新物質探索)、国立国会図書館の北島顕正氏(レアイベントサンプリング)、防衛大学校の萩田克己氏(粗視化 MD)、理研の辻直人氏(非平衡動的平均場)、正木晶子氏(並列化量子モンテカルロ法)、有田亮太郎氏(超伝導転移温度計算)、名古屋大学の安藤嘉倫氏(大規模 MD)の講演が行われた。これに加えて CCMS の吉見一慶氏からは物性研のソフトウェア開発・高度化プロジェクトの成果についての報告があった。

ソフトウェア開発・高度化プロジェクトは平成 27 年度から新たに始まった企画であり、計算物質科学関連のアプリ開発を支援してコミュニティソフトの基盤強化を図ろうというものである。物性研スパコンの利用者からアプリ開発などに関する希望を前年度末までに募り、その中から審査を経て絞られた数件のテーマに対して CCMS の人員二名が支援してきた。そこから得られた初めての成果に関して報告が行われた。

本研究会では、更新を迎えるシステム B に関してどのようなアーキテクチャーが望ましいのか、今後の物性研スパコンとしてどのようなアーキテクチャーが選択肢に入ってくるのか、それぞれのアーキテクチャーの長所と短所は、ということ議論するためのパネルディスカッションが行われた。パネリストとして、鳥取大の星健夫氏、東北大学の毛利哲夫氏、東京大学の吉本芳英氏と渡辺宙志氏が選ばれ、それぞれ先進のユーザ、金研スパコン関係者、新旧の物性研スパコン管理者としての発言が行われた。会場の参加者からも質問や意見があがり、熱のこもった議論が行われた。

- 14:30-14:55 B06 尾崎 泰助 (東京大学)
「OpenMX Ver. 3.8 の開発」
- 14:55-15:20 B07 有田 亮太郎 (理化学研究所)
「高圧下硫化水素の超伝導転移温度の第一原理計算」
- 15:20-15:45 B08 押山 淳 (東京大学)
「実空間密度汎関数法による物性計算 : SiC ナノファセットの形状とスピン」
- 15:45-16:00 Coffee Break
- 16:00-16:25 B09 安藤 嘉倫 (名古屋大学)
「ソフトウェア MODYLAS を用いた大規模分子動力学シミュレーション」
- 16:25-16:50 B10 小澤 遼 (東京大学)
「遍歴磁性体における多項式展開法を用いた高効率シミュレーションによる新奇な非共面的磁気秩序状態の探索」
- 16:50-17:30 B11 吉見 一慶 (東京大学)
「東京大学物性研究所 ソフトウェア開発・高度化プロジェクトについて」
- 17:30- Closing

Poster Session 月 4 日 (月) 16:15-17:45 <6 階ラウンジ>

-
- P01 萩田 克美 (防衛大学校) 「ペンタグラフェンの物性と工学応用構造体の計算」
- P02 原田 健自 (京都大学) 「分岐とテンソルネットワーク」
- P03 羽田野 直道 (東京大学) 「局在長の多項式展開 : エルミート系と非エルミート系」
- P04 弘瀬 大地 (東京大学) 「第一原理 GW+*Bethe-Salpeter* 法によるポルフィリンの解析」
- P05 井戸 康太 (東京大学) 「非平衡強相関電子系のための時間依存多変数変分モンテカルロ法」
- P06 笠松 秀輔 (東京大学) 「vdW-DF+U 法による固体酸素の低圧相および高磁場相の第一原理計算」
- P07 加藤 岳生 (東京大学) 「物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps」
- P08 川崎 愛理 (東京大学) 「量子埋め込み法を用いた多体波動関数理論」
- P09 水田 耀ビエール (金沢大学) 「大きな異常熱電効果を示すスキルミオン結晶物質の第一原理的探索に向けて」
- P10 森田 悟史 (東京大学) 「分散メモリ型並列行列積演算の GPGPU 化」
- P11 本山 裕一 (東京大学) 「連続空間中の量子モンテカルロ法における拡張アンサンブル法」
- P12 中川 恒 (東京大学) “Shape transformations of bilayer membrane induced by hydrolysis reaction”
- P13 越智 裕紀 (東京大学) 「転送行列法によるスケーリング次元の数値的研究」
- P14 大久保 毅 (東京大学) 「大規模並列モンテカルロ法による Z_2 ボルテックス転移の研究」
- P15 鈴木 隆史 (兵庫県立大学) 「蜂の巣格子キタエフ・ハイゼンベルク模型の動的性質」
- P16 只野 央将 (東京大学) 「熱電材料 SnSe におけるソフトモードと格子熱伝導率の第一原理計算」
- P17 渡辺 宙志 (東京大学) 「一般化 Langevin 方程式における温度と H 定理」
- P18 山口 直也 (金沢大学) 「SrTiO₃ 薄膜におけるスピン軌道相互作用と層分極の第一原理計算」
- P19 山地 洋平 (東京大学) 「高並列汎用量子格子模型ソルバーパッケージ HΦ」
- P20 山本 良幸 (東京大学) 「水素不純物の荷電状態を移り変わる反応の第一原理計算」
- P21 吉本 芳英 (東京大学) 「第一原理計算プログラム xTAPP の高度化」
- P22 吉澤 香奈子 (RIST) 「第一原理計算 GUI 支援ソフトウェア TAPIOCA と C-Tools の開発」



18:00 **Poster session (Chair: Satoshi Watanabe)**

Wednesday, 22 November 2017

Catalysis (Chair: Katsuyuki Fukutani)

- 09:00 Kazunari Domen “Water splitting on particulate photocatalysts”
- 09:30 Takato Mitsudome “Cooperative Catalysis between Metal and Oxide for Environmentally Friendly Molecular Transformations”
- 10:00 Sylvain Clair “Symmetry-driven catalytic activity of silver surfaces”
- 10:20 Tea break

Catalysis (Chair: Zdenek Dohnalek)

- 10:40 Michael Trenary “Spectroscopic Characterization of Reaction Pathways over a Pd-Cu(111) Single-Atom Alloy”
- 11:10 Atsushi Urakawa “Hunting Surface Intermediates and Active Sites in Carbon Dioxide Conversion Catalysis”
- 11:40 Peter McBreen “Structure and Dynamics of Single Chirality-Transfer Complexes on Pt(111)”
- 12:00 Lunch

Functional molecules at surface and interface (Chair: Tadahiro Komeda)

- 13:30 Rasmita Raval “Supramolecular and Covalent Assembly of Molecules at Surfaces: Chirality, Complexity and Diversity”
- 14:00 Jun Terao “Synthesis of Functionalized Molecular Wires”
- 14:30 Ryo Yamada “Current Rectification of Single-Molecule Carbazole-Oligomer Junctions: the Role of Asymmetrical Deformations of Molecular Orbitals”
- 15:00 Tea break

Single molecule spectroscopy and transport (Chair: Yousoo Kim)

- 15:30 Maki Kawai “Variety of Molecular Functions Induced by the Interaction with Substrates”
- 16:00 Jascha Repp “Tracking the ultrafast motion of a single molecule by femtosecond terahertz scanning tunneling microscopy”
- 16:30 Hiroshi Okuyama “Controlled switching of single-molecule junctions by mechanical motion of a phenyl ring”
- 17:00 Masaru Tsukada “Theoretical Aspects of SPM and Transport in Molecules”
- 17:30 **Student prize award ceremony** (Junji Nakamura)
- 19:00 **Banquet** (at Toutenko (東天紅))

Thursday, 23 November 2017

Low-dimensional exotic materials (Chair: Iwao Matsuda)

- 09:00 Young Kuk “Electronic and Phononic Structure Measurements on Superconducting Surfaces using Scanning Tunneling Microscopy”
- 09:30 Mikito Koshino “Physics of Moiré Interfaces in 2D Materials”
- 10:00 Yasuo Yoshida “Direct visualization of surface-induced orbital order”
- 10:20 Tea break

Low-dimensional materials at surfaces (Chair: Yoshitada Morikawa)

- 10:40 Nicolas Lorente “Magnetic impurities on superconducting surfaces: Shiba and Majorana states studied with the STM”
- 11:10 Emi Minamitani “Atomic-Scale Investigation of the Interfacial Phonon at Graphene/SiC”

- PS23 Kensuke Kimura “Phosphorescence detection from a single molecule with an STM”
- PS24 Hiroyuki Koshida “Formation of (NO)₃ and (NO)₄-water on Cu(111)”
- PS25 Youngjoon An “Interfacial electronic structures between pi-conjugated molecules on Au(111)”
- PS26 Chun Ouyang “Electron Tunnelling through Rigid Molecular Wire Anchored between Nanogap Electrodes and on Metal Surface”
- PS27 Minhui Lee “Computational study on the formation of a highly-ordered hydroxylated graphene epitaxially-grown on Cu(111)”
- PS28 Luo Uei Liang “Scanning tunneling microscope study of Phenacene Derivatives on Au(111)”
- PS29 Peiyong Li “Exploration of fluorescent-tagged peptides diffusing on boron nitride by single molecular imaging”
- PS30 Natsuhiko Shimizu “High yield safe synthesis of black phosphorus”
- PS31 Takakazu Seki “Electrochemical modulation of peptides organization on two-dimensional materials “
- PS32 Fumihito Imoto “First-principles study of the atomic and electronic structure of the 4H-SiC(1102)-(2x1) surface”
- PS33 Kohei Sakuma “Structural stability of self-assembled peptides as a molecular scaffold on 2D nano-materials for Biosensors”
- PS34 Maria Herminia Balgos “Spatio-temporal characterization of the electrical and optical properties of LT-GaAs structures for THz applications”
- PS35 Yuhei Kikuchi “The dielectric function of atomically thin MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂ observed by linear and non-linear optical measurements”
- PS36 Shigemi Terakawa “Electronic structure and phase transition of In/Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -hex surface”
- PS37 Yu-Hsiang Yen “Scanning tunneling microscope study of a mixed phase 2D self-assembly organic system: PTCDA on Au(111)”

POSTER (contributed)

- P1 Siew San Tan “Improvement of the Variation of Absorption Intensities with pH of Ruthenium(II) Polypyridine Complex with Elongation of the Conjugated Ligands: An Experimental and Theoretical Investigations”
- P2 Shuhei Ogo “Reaction mechanisms of oxidative coupling of methane over Ce₂(WO₄)₃ catalysts at low temperatures in an electric field”
- P3 Akira Yamakata “Principal Difference in the Behaviors of Photogenerated e⁻ and h⁺ in Anatase and Rutile TiO₂ Powders”
- P4 Taketoshi Minato “Interface Structure between Graphite and Organic Electrolyte Investigated by Frequency Modulation Atomic Force Microscopy”
- P5 Takanori Koitaya “Activation of carbon dioxide on Zn-deposited Cu surfaces studied by ambient-pressure X-ray photoelectron spectroscopy”
- P6 Shen Ye “Structure and Stability of the Lipid Monolayer on the Water Surface”
- P7 Susumu Shiraki “Very-Low Solid-Electrolyte/Electrode Interface Resistance in Li(Ni_{0.5}Mn_{1.5})O₄-Based Thin-Film Battery”
- P8 Canceled
- P9 Kenichi Ozawa “Carrier lifetime as a primary factor for crystal-face dependence of photocatalytic activity on rutile and anatase TiO₂”
- P10 Fahdzi Muttaqien “Dynamics of Desorbed CO₂ as a Product of Formate Decomposition”
- P11 Ingo Salzmann “Local processes in the molecular doping of poly(3-hexylthiophene)”
- P12 Qiuyi Yuan “Reaction mechanism of Galvanic Displacement Reaction of Pt on Au(111)”

- P43 Eiichi Inami “Room temperature stable film formation of π -conjugated organic molecules on 3d-magnetic substrate”
- P44 Songpol Chaunchaiyakul “Nanoscale Dehydrogenation on a Self-Assembled Monolayer Observed by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy”
- P45 Holly Walen “Sulfur atom adsorption on Cu surfaces: Characterization and Stability”
- P46 Norio Okabayashi “Vibrational state of a single molecule influenced by the force from a tip”
- P47 Kozo Mukai “Electronic states of Pt single atom and cluster supported on graphene studied by synchrotron radiation XPS”
- P48 Puneet Mishra “Spatially Resolved Magnetic Anisotropy of Cobalt Nanostructures on Au(111) Surface”
- P49 Rafael Jaculbia “Towards single molecule nanospectroscopy in LT-UHV environment using STM-TERS”
- P50 Shiro Yamazaki “AFM/STM-induced atom-scale catalytic switching of molecule-like Si “
- P51 Hiroshi Imada “Single-molecule investigation of plasmon-exciton coupling”
- P52 Ryuichi Arafune “Spectroscopic demonstration of surface opto-spincurrent on Ir(111) covered by graphene”
- P53 Shin-ichiro Tanaka “Direct observation of the electron-phonon coupling between empty states in graphite via high-resolution electron energy loss spectroscopy”
- P54 Zheng Liu “In-Situ Observation of H-BN/Graphene Heterostructure Synthesized in a STEM”
- P55 Chun-Liang Lin “Quasiparticle Scattering in Type-II Weyl semimetal MoTe_2 ”
- P56 Masahiro Shibuta “Observation of Two-Dimensionally Delocalized Exciton Confined in an Aromatic Molecular Monolayer Formed on Organic Insulating Layer”
- P57 Hung-Hsiang Yang “Protecting Topological Surface State by Organic Monolayer”
- P58 Shozo Suto “Preparation of the anisotropic low dimensional structure of hydrogen terminated Si(110)-(1x1) surface: Structures, electronic band structures, surface phonons and applications”
- P59 Md. Zakir Hossain “Solution processed organic functionalization of graphene”
- P60 Takahiro Kondo “Hydrogen boride sheets derived from MgB_2 by cation exchange”
- P61 Matthias Koch “Single shot spin readout with a 3D crystalline transistor”
- P62 Zeyuan Ni “Germanene and stanene on 2D substrates: Dirac-cone and Z_2 invariant”
- P63 Chi-Cheng Lee “Studies of absolute binding energies of core electrons in epitaxial silicene on $\text{ZrB}_2(0001)$ ”
- P64 Fumio Komori “Graphene nanoribbons on periodic nanofacets of SiC”
- P65 Shohei Ogura “Development of a spin-polarized atomic hydrogen beam”
- P66 Jun Yoshinobu “Oxidation and nitridation of silicene on $\text{ZrB}_2/\text{Si}(111)$ with NO”
- P67 Hiroko Yamada “On-Surface Reactivity Investigation of Partially Fluorinated Anthracene Trimers on Au(111)”

なお、本国際会議の要旨集は以下の URL からダウンロードすることができる。

http://yoshinobu.issp.u-tokyo.ac.jp/IIRC5_Program_booklet-Final.pdf

換がなされた。非常に多様な学生が参加するため、分野分けは一つの課題となっており、今回のアンケートでも不満の声も見られた。その点は今後改善していきたい。また今回は座長をスタッフが務めたが、次回以降、参加者から希望者を募り座長を任せても良いのではないかという意見も出た。口頭発表の座長の経験も得難いものであり、そこから学ぶことも多いため、今後取り入れることを検討する。今年度新企画として開催されたフリーセッションでは、多くの参加者が一堂に会し、様々な発表・議論を行った。その様子は写真3左に示してある。例年議論し足りないという意見があるため、その不足分を補う目的で参加者が自由に議論を行える場として企画した。企画ではポスターを用いた議論、口頭発表のより深い議論などに加え、フリーセッションに向けた個人企画を用意してきた参加者も見受けられ、会場は活気に包まれていた。アンケートでも、各発表の議論に加え講義やゼミでの疑問点の解消に活用されていたことが見受けられ、目的はかなったといえる。来年度も継続を望む声も多く、望外の成功をおさめた。今後の課題として、参加者間でフリーセッションでの議論の予定調整をする工夫が求められた。次回に反映させよりよい企画として進化していくことを願う。ポスターセッション、分科会ではそれぞれ参加者の投票による賞を設けた。ポスターセッションでは最優秀ポスター賞を松本拓巳氏、優秀ポスター賞を川畑幸平氏、石川慧氏スピーカー賞を水田郁氏、デザイン賞を金子和哉氏が受賞した。分科会では井口照悟氏、下野聖矢氏、副島智大氏、古川頼誉氏、嶋屋拓朗氏、山家一樹氏が最優秀発表者賞を受賞した。

参加者の交流の機会としては座談会・懇談会が行われた。座談会においては、参加者から募った質問が講師に投げかけられ、普段はききづらい話題について交流が行われた。その様子を写真3右に示してある。日常的な悩みから、研究における悩みに至るまで、参加者にとっての目標でもある講師の意見を伺うことができた。会場からも追加で質問がなされるなど大いに盛り上がった。懇談会では一方、講師と学生の対話や、学生間の議論も行われた。懇談会の時間に研究内容に関する議論を継続している姿も見られ、交流の場にとどまらない時間となった。

3 参加者の声と今後の課題

本夏の学校は物性物理学という広い分野を対象にしているため、様々な専攻・所属・学年の研究者が一堂に会するという点、講義・集中ゼミ合わせて18種類の多様な講演に大きな特徴を持つ。実際参加者のアンケートでは、普段接点のない研究者と交流が持てたことや、議論・講義を通じて新たな知見を得られたことなどに高い評価を頂戴した。中には、本夏の学校を通じて研究テーマを見つけた、という参加者も存在するなど、高い影響力を持つ企画であることがうかがえた。

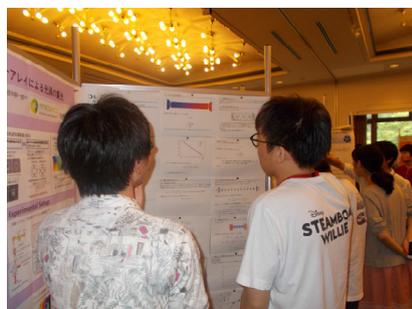


写真2 左：ポスターセッションの様子。参加者は活発に議論を行っていた。右：分科会の様子。座長はスタッフが務めている。



写真3 左：フリーセッションの様子。ポスターボードに加え、机、ホワイトボードを用意した。活発な議論が交わされた。右：座談会の様子。講師の先生に学生から寄せられた質問に答えていただいた。

表3 第62回収支報告

収入 (単位: 円)	
項目	決算額
1 公的機関援助	1,654,649
1 岐阜県清流の国推進部清流の国づくり政策課	400,000
2 (公財) 岐阜観光コンベンション協会	140,000
3 東北大学金属材料研究所	200,000
4 東京大学物性研究所	379,529
5 京都大学基礎物理学研究所	435,120
6 (一財) 材料科学技術振興財団	100,000
2 企業等協賛金	872,000
3 参加費	644,000
4 前年度繰越金	1,192,917
合計	4,363,566

支出 (単位: 円)	
項目	決算額
1 講師招聘費	683,360
2 スタッフ援助費	976,450
3 印刷費	619,622
1 テキスト印刷・郵送費	400,081
2 ポスター印刷・郵送費	87,133
3 当日配布物印刷・郵送費	132,408
4 企画運営費	450,964
1 会議室使用料	345,600
2 備品レンタル料・送料	88,433
3 企画景品	16,931
5 参加者援助費	296,275
6 準備局経費	353,273
1 下見費用	29,952
2 備品購入費	74,142
3 前泊代金	92,519
4 後泊代金	42,080
5 サーバーレンタル	73,440
6 協賛関連事務費	3,220
7 振込手数料	13,442
8 会場事務にかかる費用	10,000
9 その他携帯料金、送料など	14,478
7 次年度繰越金	983,622
合計	4,363,566



物性研究所セミナー

標題：国際強磁場科学セミナー：2017 年度第 4 回：High-field magnetism in the heavy-fermion materials
CeRh₂Si₂ and URu₂Si₂

日時：2017 年 10 月 2 日(月) 午後 2 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 2 セミナー室 (A612)

講師：Dr. William Knafo

所属：Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses (LNCMI), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), フランス

要旨：

Extreme conditions of intense magnetic field and high pressure are powerful tools to tune the microscopic interactions and explore the magnetic phase diagrams of strongly-correlated electrons systems, as heavy-fermion magnets.

An introduction to the LNCMI-Toulouse pulsed field facility will be given, with a focus on recent technical advances, as the generation of non-destructive pulsed fields up to 99 T, the combination of pulsed fields up to 60 T and high pressures up to 4 GPa, and the possibility to perform neutron diffraction under long-duration pulsed fields up to 40 T. Then I will show recent experimental studies performed using these new setups.

In a first part [1-3], I will present an investigation of the three-dimensional pressure - magnetic field - temperature phase diagram of the heavy-fermion antiferromagnet CeRh₂Si₂ thanks to our new pressure cells. This phase diagram shows a temperature- and pressure-dependent decoupling of the critical and pseudo-metamagnetic fields, at the borderlines of antiferromagnetism and strongly-correlated paramagnetism. It is representative of a class of heavy-fermion Ising antiferromagnets, where long-range magnetic ordering is decoupled from a maximum in the magnetic susceptibility. Recent neutron diffraction results obtained in phase AF3 between 25.5 and 26 T (at ambient pressure) will also be shown.

In a second part [4-5], I will present a neutron diffraction study - with our new 40-T magnet - of URu₂Si₂. This paramagnetic system is well-known for its mysterious “hidden-order” phase, which develops below $T_0 = 17.5$ K, and can be destabilized under pressure or high magnetic field. We have shown that a spin-density wave is stabilized under a high magnetic field from 35 to 39 T applied along *c*. The interplay between the hidden order, the magnetic and Fermi surface properties of URu₂Si₂ will be discussed.

These works have been done in collaboration with Dai Aoki, Fabienne Duc, Frédéric Bourdarot, Rikio Settai, Daniel Braithwaite, Keitaro Kuwahara, Hiroyuki Nojiri, Naveen Kumar, Shuhei Kurahashi, Julien Billette, Paul Frings, Xavier Tonon, Eddy Lelièvre-Berna, Louis-Pierre Regnaut and Jacques Flouquet.

References:

1. “Development of Bridgman-Type Pressure Cell for Pulsed High Magnetic Field”, R. Settai, W. Knafo, D. Braithwaite, S. Kurahashi, D. Aoki, and J. Flouquet, *Review of High Pressure Science and Technology / Koatsuryoku No Kagaku To Gijutsu* 25, 325 (2015).
2. “Pressure cell for transport measurements under high pressure and low temperature in pulsed magnetic fields”, D. Braithwaite, W. Knafo, R. Settai, D. Aoki, S. Kurahashi, and J. Flouquet, *Rev. Sci. Instrum.* 87, 023907 (2016).
3. “Three-dimensional critical phase diagram of the Ising antiferromagnet CeRh₂Si₂ under extreme conditions of pressure and magnetic field”, W. Knafo, R. Settai, D. Braithwaite, S. Kurahashi, D. Aoki, and J. Flouquet, *Phys. Rev. B* 95, 014411 (2017).

4. “Field-induced spin-density wave beyond hidden order in URu₂Si₂”, W. Knafo, F. Duc, F. Bourdarot, K. Kuwahara, H. Nojiri, D. Aoki, J. Billette, P. Frings, X. Tonon, E. Lelièvre-Berna, J. Flouquet, and L.-P. Regnault, *Nature Commun.* 7, 13075 (2016).

標題：量子物質セミナー：Quantum spin liquid in honeycomb iridates H₃LiIr₂O₆ : low temperature specific heat studies

日時：2017年10月2日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Yosuke Matsumoto

所属：Max Planck Institute for Solid State Research, Department of Quantum Materials (Takagi group)

要旨：

Recently, layered spin-orbit Mott insulators with two-dimensional (2D) honeycomb lattice attract a lot of attention because of possible quantum spin liquid (QSL) states. In particular, Kitaev model, which is a bond dependent Ising model on a honeycomb lattice provides an unique example of an exactly soluble 2D model with topological QSL ground state and fractionalized excitations [1]. Surprisingly, this rather artificial setting, *i.e.*, the bond dependent Ising interactions, has been suggested to be realized in honeycomb iridates composed of edge-sharing IrO₆ octahedra [2]. Here, the unique $J_{eff} = 1/2$ state arising from the strong spin-orbit interaction of Ir⁴⁺ ion is the key ingredient.

While all the candidates suggested so far, such as a-A₂IrO₃ (A = Li, Na) and b-Li₂IrO₃, magnetically order at finite temperatures [3-5], a recently developed new compound H₃LiIr₂O₆ turned out to be a promising candidate of QSL on a honeycomb lattice [6]. Magnetic susceptibility and ⁷Li-, ¹H-NMR measurements do not indicate any anomaly down to 0.5 K in spite of the large Weiss temperature $q_w \sim -90$ K. NMR spectra are quite sharp with a width of about 0.001 mB and exhibit no broadening on cooling demonstrating the cleanest spin liquid ever observed. Both Knight shift and $1/(T_1T)$ suggest the existence of gapless excitations. Especially, almost constant $1/(T_1T)$ in weak magnetic fields below 20 K resembles Korringa law inherent to Fermi liquid.

Here I further present the results of the low temperature specific heat (C) measurements. No ordering have been found down to the lowest temperature of 30 mK. Interestingly, C/T at zero-magnetic field exhibits a weakly diverging behavior with $1/T^{0.5}$ temperature dependence. On the other hand, this weakly diverging behavior is suppressed under magnetic field and instead there appears a power law behavior with $C \sim T^2$, which is consistent with 2D Dirac fermions. Furthermore, we found a T/B scaling with a form $C/B^{0.5} \sim f(T/B)$ for all the data obtained in the temperature and field range below 1 K and 8 T. Interestingly, field induced suppression found in $1/T_1$ is fully consistent with the T/B scaling, if we assume that both C and $1/T_1$ reflect the density of states arising from the same fermionic excitations. In this presentation, I will further discuss the implication of these observations and possible scenarios for the QSL behaviors. This work has been done in collaboration with Tomohiro Takayama, Kentaro Kitagawa, Riku Takano, Robert Dinnebier, George Jackeli and Hidenori Takagi.

[1] A. Kitaev, *Ann. Phys. (N.Y.)* 321, 2 (2006).

[2] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* 102, 017205 (2009).

[3] Y. Singh and P. Gegenwart, *Phys. Rev. B* 82, 064412 (2010).

[4] Y. Singh, S. Manni, J. Reuther, T. Berlijn, T. Thomale, W. Ku, S. Trebst and P. Gegenwart, *Phys. Rev. Lett.* 108, 127203 (2012).

[5] T. Takayama, A. Kato, R. Dinnebier, J. Nuss, H. Kono, L. S. Veiga, G. Fabbri, D. Haskel and H. Takagi, *Phys. Rev. Lett.* 114, 077202 (2015).



[6] K. Kitagawa, T. Takayama, Y. Matsumoto, A. Kato, R. Takano, Y. Kishimoto, R. Dinnebier, G. Jackeli and H. Takagi, *preprint* (2017).
Y.Matsumoto@fkf.mpg.de

標題：物質・物性セミナー：Quasi-two dimensional (q2D) organic Mott insulators as seen by inelastic light scattering: from spin liquid to dipole liquid

日時：2017年10月2日(月) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Natalia Drichko

所属：Department of Physics and Astronomy, Johns Hopkins University

要旨：

Mott insulators are commonly pictured with electrons completely localized on lattice sites. Their low-energy physics involves spins only. In addition, it was shown theoretically that new charge degrees of freedom can emerge in molecule-based Mott insulators as electrons occupy extended molecular orbitals, and can result in a quantum dipole liquid state. We probe few BEDT-TTF-based 2D Mott insulators using Raman scattering technique. We identify magnetic excitation in an antiferromagnetic compound κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl and a spin liquid candidate κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃. We show that their spectrum of excitations is very different from that of a new triangular lattice Mott insulator κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Br. Our data demonstrate an existence of quantum dipole liquid in this compound. Here, when in the Mott insulating state electrons localize on dimer (BEDT-TTF)₂lattice sites, they form electric dipoles which do not order at low temperatures. We experimentally detect charge fluctuation with frequency of about 50 cm⁻¹ using Raman spectra of vibrations of BEDT-TTF molecule. In addition, in the low frequency Raman scattering response we detect a collective mode at about 50 cm⁻¹ due to respective dipole fluctuations. Heat capacity of κ -(BEDT-TTF)₂Hg(SCN)₂Br demonstrates a linear term at low temperatures, supporting a scenario where the composite spin and electric dipole degrees of freedom remain fluctuating down to the lowest temperatures.

標題：理論セミナー：Anomaly Manifestation of Lieb-Schultz-Mattis Theorem and Topological Phases

日時：2017年10月6日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Chang-Tse Hsieh

所属：Kavli IPMU / ISSP

要旨：

The Lieb-Schultz-Mattis (LSM) theorem dictates that any one-dimensional electronic lattice system cannot be a trivial symmetric insulator if the filling per unit cell is not integral and if the lattice translation symmetry and particle number conservation are strictly imposed. In this talk, I will make a comparison between such one-dimensional metallic (gapless) states enforced by the LSM theorem and the boundary gapless states of one-higher dimensional symmetry-protected topological (SPT) phases, from the perspective of quantum anomalies. These two kinds of systems are the rare circumstances where the emergent structures of many-body systems are largely constrained by microscopic kinematic data such as symmetries and spatial dimensions. While at low-energy they are both described by the same effective field theory with the same effective symmetry realizations on low-energy modes, wherein non-site lattice translation symmetry is encoded as if it is a local symmetry, the anomalies of the symmetry in the low-energy theory play different roles in these two systems. In particular, as I will show, the usual chiral anomaly is equivalent to the LSM theorem, whereas there is another anomaly which is not related to the LSM theorem but

can be at the origin of a new type of 2D systems, $(\text{CNB-EDT-TTF})_4\text{X}$, ($\text{X} = \text{ClO}_4^-$, PF_6^- , I_3^- , ...) which are characterized by a unique bilayer structure of the donors.

This novel type of salts exhibit 2D metallic properties with special characteristics derived both from the unusual stoichiometry and the weak interaction between paired layers. These properties are related to a high band filling, large electronic effective masses and quasi degenerated 2D Fermi surfaces, as predicted by band structure calculations and in agreement with electron transport measurements in single crystals. Depending on the donor packing pattern some of these 2D metals can present superconductivity at temperatures close to 3K.

The formation of the bilayers by self-assembly is however critically dependent on the counter anions and growth conditions. The rich variety of polymorphism and physical properties that has been recently observed in these $(\text{CNB-EDT-TTF})_4\text{X}$ salts will be also presented in detail.

標題：理論セミナー：Dynamics of confined membranes

日時：2017年10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：Olivier Pierre-Louis

所属：CNRS-ILM, Universite Lyon-1

要旨：

Bilayer lipid membranes are abundant in biological systems. They are found in cell membranes, skin, pupils, articulations and pulmonary organs. In biological environments, these membranes are often confined by other membranes or by various substrates. We have investigated the role of confinement on the dynamics of lipid membranes. We first derive a lubrication model for an inextensible bilayer lipid membrane confined between two parallel and flat attractive walls. The resulting model shares similarity the Swift-Hohenberg equation, and with standard coarsening models such as the time-dependent Ginzburg-Landau equation or the Cahn-Hilliard equation. However, our model exhibits a specific behavior controlled by the fixed total quantity of lipids in the system, which imposes a constant total membrane area.

We find that membranes with smaller intrinsic areas form frozen finite-size flat adhesion domains, while membranes with a larger intrinsic area form a frozen labyrinthine wrinkle phase. For intermediate areas, coarsening is found, i.e. an endless increase of the size of adhesion domains. This coarsening behavior is associated to a coexistence between flat adhesion domains and wrinkle domains.

標題：ナノサイエンスセミナー：Spin-polarized scanning tunneling microscopy with quantitative insights into magnetic probes

日時：2017年10月30日(月) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 第2会議室 (A635)

講師：Dr. Soo-hyon Phark

所属：enter for Quantum Nanoscience, Institute for Basic Science and

要旨：

Spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy (spin-STM/S) has been successfully applied to magnetic characterizations of individual nanostructures. Spin-STM/S is often performed in magnetic fields of up to some Tesla, which may strongly influence the tip state. In spite of the pivotal role of the tip, the contribution of the tip in spin-STM/S has rarely been investigated in detail. In this talk, an advanced analysis of spin-STM/S data measured on magnetic nanoislands, which relies on a quantitative magnetic characterization of tips, will be discussed. In-field

spin-STM on Co bilayer nanoisland on Cu(111) has enabled a quantitative determination, and thereby, a categorization of the magnetic states of the tips. The resulting in-depth and conclusive analysis of magnetic characterization of the tip opens new venues for a clear-cut sub-nanometer scale spin ordering and spin-dependent electronic structure of the non-collinear magnetic state in bilayer high Fe nanoislands on Cu(111).

This work has been performed in collaboration with Dirk Sander, Max-Planck-Institute of Microstructure Physics, Halle, Germany.

References:

- [1] Rodary, Wedekind, Oka, Sander, Kirschner, Appl. Phys. Lett. 95, 152513 (2009).
- [2] Oka, Ignatiev, Wedekind, Rodary, Niebergall, Stepanyuk, Sander, Kirschner, Science 327, 843 (2010).
- [3] Corbetta, Ouazi, Borme, Nahas, Donati, Oka, Wedekind, Sander, Kirschner, Jpn. J. Appl. Phys. 51, 208 (2012).
- [4] Phark, Fischer, Corbetta, Sander, Kirschner, Appl. Phys. Lett. 103, 032407 (2013).
- [5] Nagai, Hata, Oka, Sander, Kirschner, Appl. Phys. Exp. 7, 025204 (2014).
- [6] Sander, Phark, Corbetta, Fischer, Oka, Kirschner, J. Phys.: Condens. Matter 26, 394008 (2014).
- [7] Phark, Fischer, Corbetta, Sander, Nakamura, Kirschner, Nat. Commun. 5, 5183 (2014).
- [8] Fischer, Sandratskii, Phark, Ouazi, Pasa, Sander, Parkin, Nat. Commun. 7, 13000 (2016).
- [9] Phark, Sander, Nano Convergence 4, 8 (2017).

標題：理論インフォーマルセミナー：Spin Transitions in Spiro-Biphenalenyl-based radicals: Identification of the driving forces and the origin of bistability

日時：2017年10月31日(火) 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. Jordi Ribas

所属：Materials Science and Physical Chemistry Department, Universitat de Barcelona

要旨：

Spiro-biphenalenyl (SBP) boron radicals constitute an important family of molecules for the preparation of functional organic materials. The building blocks of several SBP-based crystals are π -dimers of these radicals, in which two phenalenyl (PLY) rings face each other and the other two PLYs point away from the superimposed PLYs. The dimers of ethyl-substituted-SBP and butyl-substituted-SBP undergo a spin transition that results in changes in the magnetic, optical and conducting properties of the material. The spin transition of ethyl-SBP occurs at around 140 K, while the spin transition of butyl-SBP occurs with a hysteretic loop 25 K wide centered at 335 K. In this talk, the results of a computational study aimed at identifying the driving forces of these spin transitions will be presented. The origin of the hysteresis in the phase transition of butyl-SBP will be also disclosed. In particular, it will be shown that electrostatic interactions between radicals play a key role in enabling the spin transitions and that the bistability of butyl-SBP originates in the coupling between the spin transition of its π -dimers and the conformational switch of its butyl chains.



標題：中性子セミナー：Critical dynamics of quantum magnets observed by neutron scattering

日時：2017年11月1日(水) 午後3時～午後4時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Kirill Povarov

所属：スイス連邦工科大学チューリッヒ校

要旨：

Much of interest in quantum magnetic systems is driven by the fact that they serve as excellent realization of quantum critical phenomena. In these situations the finite temperature properties of the materials are defined by the quantum-disordered ground state. Often this concerns not just the thermodynamic properties, but also the details of the excitation spectra [1], which can be directly probed by inelastic neutron scattering. Despite quantum critical dynamics in 1D magnets is rather ubiquitous and has many faces, experimentally observing it is challenging and requires a careful choice of the model material and the measurement parameters. Nonetheless, today's progress in sample synthesis and neutron instrumentation allows to verify many of the long-standing theoretical predictions.

The recent achievements include the “tunable” Tomonaga-Luttinger spin liquids (TLSL) in magnetized $S=1/2$ spin chains [2] and ladders [3]. In these systems the interactions between the effective fermionic quasiparticles vary as a function of external field [4], and sometimes can even be made attractive instead of a conventional repulsion. In addition to extended quantum critical phases such as TLSL, quantum critical dynamics can be also observed at isolated quantum critical points. For instance, “Ising model in transverse field” -type critical dynamics can be found in a dimerized $S=1$ chain [5]. The most recent example are the excitations at the saturation field of a quantum spin chain, representing $z=2$ critical point in one dimension [6]. Inherent to this QCP is the parameterless scaling, known as “zero-scale universality” [7], which, however, is found to be obscured at elevated temperatures.

[1] M. Vojta, Rep. Prog. Phys. 66, 2069 (2003).

[2] M. Haelg *et al.*, Phys. Rev. B 92, 104416 (2015).

[3] K. Povarov *et al.*, Phys. Rev. B 91, 020406 (2015).

[4] T. Giamarchi, *Quantum physics in one dimension* (Oxford University Press, 2003).

[5] M. Haelg *et al.*, Phys. Rev. B 92, 014412 (2015).

[6] D. Blosser *et al.*, arXiv:1707.05243, accepted for Phys. Rev. B

[7] S. Sachdev *et al.*, Phys. Rev. B 50, 258 (1994).

標題：量子物質セミナー：Unveiling the Ground State Properties of the $S=1/2$ Kagome Heisenberg Antiferromagnet $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ via Single Crystal NMR

日時：2017年11月6日(月) 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. Mingxuan Fu

所属：Department of Physics, University of Toronto

要旨：

The experimental quest for a quantum spin-liquid state (QSL) in frustrated magnetic systems serves fundamental scientific interests, as this intriguing quantum phase provides a fascinating platform for discovering exotic collective phenomena. The $S=1/2$ kagome Heisenberg antiferromagnet $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ (herbertsmithite) is one of the leading contenders for an experimental realization of a QSL; in particular, the discovery of a continuum of spinon excitations using inelastic neutron scattering [1] has stimulated intense research into its physical properties. However, the nature of the paramagnetic ground state in this material remains highly debated, primarily owing to the difficulty in revealing

the intrinsic magnetic behaviour of the kagome lattice from defect contributions.

We will discuss our single crystal NMR measurements to probe the local spin susceptibility, low-frequency spin fluctuations, and the effects of defect Cu^{2+} spins occupying the Zn^{2+} sites. Most importantly, we demonstrate that the low-temperature behaviour of the intrinsic spin susceptibility provides direct evidence for a QSL state with a small energy gap in $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ [2].

[1] T. H. Han, J. S. Helton, S. Chu, D. G. Nocera, J. A. Rodriguez-Rivera, C. Broholm and Y. S. Lee, *Nature* 492, 406 (2012).

[2] M. Fu, T. Imai, T. H. Han and Y. S. Lee, *Science* 350, 655 (2015).

標題：セミナー：熱・スピン相互変換

日時：2017年11月10日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：大沼 悠一

所属：日本原子力研究開発機構

要旨：

電子のスピン自由度の流れであるスピン流は、電流を伴わないため、エネルギー損失を抑えた情報伝達を可能にすると期待されている[1]。スピン流を生成する手法の一つとしてスピンゼーバック効果が知られている[2-4]。磁性体と金属の接合系において、熱からスピン流が生成される。生成スピン流は金属に注入され、スピン軌道相互作用を起源とするスピンホール効果[1]を通して電流に変換される。スピンゼーバック効果が磁性絶縁体であっても発現することから、スピン流を介した新しい熱電発電機構として注目を集めている。

スピンゼーバック効果に対して、その逆効果であるスピンペルチェ効果、つまりスピン流による熱流生成現象が近年報告された[5, 6]。磁性体と金属の接合系において金属に電流を流すと、スピンホール効果によって電流がスピン流に変換され、磁性体に注入される。この時、同時に熱流が生成され磁性体に注入される。実際に、金属と磁性絶縁体の界面において発熱と吸熱が同時に観測された[6]。

本講演では、非平衡グリーン関数法を用いて構築した、スピンゼーバック効果とスピンペルチェ効果を統一的に記述する理論を説明し[7]、熱とスピンの相互変換現象の微視的機構を明らかにする。

[1] S. Maekawa, S. O. Valenzuela, E. Saitoh, and T. Kimura, ed., “Spin Current”, Oxford, 2012.

[2] K. Uchida et al., *Nature (London)* 455, 778 (2008).

[3] K. Uchida et al., *Nat. Mater.* 9, 894 (2010).

[4] C. M. Jaworski et al., *Nat. Mater.* 9, 898 (2010).

[5] J. Flipse et al., *Phys. Rev. Lett.*, 113, 027601 (2014).

[6] S. Daimon et al., *Nat. Commun.* 7, 13754 (2016).

[7] Y. Ohnuma et al., *Phys. Rev. B* 96, 134412 (2017).



標題：量子物質セミナー：Chiral liquid phase of simple quantum magnets

日時：2017年11月20日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師：Prof. Oleg Starykh

所属：Department of Physics and Astronomy, University of Utah

要旨：

We study a $T = 0$ quantum phase transition between a quantum paramagnetic state and a magnetically ordered state for a spin $S = 1$ XXZ Heisenberg antiferromagnet on a two-dimensional triangular lattice. The transition is induced by an easy plane single-ion anisotropy D . At the mean field level, the system undergoes a direct transition at a critical $D = D_c$ between a paramagnetic state at $D > D_c$ and an ordered state with broken $U(1)$ symmetry at $D < D_c$. We show that beyond mean-field the phase diagram is very different and includes an intermediate chiral liquid phase. Specifically, we find that the Ising (J_z) component of the Heisenberg exchange creates an attraction between magnons in the paramagnetic phase and binds magnons into a two-particle bound state. This two-magnon bound state condenses at $D > D_c$, pre-empting single particle condensation, and gives rise to a chiral liquid phase which spontaneously breaks spatial inversion symmetry, but leaves the spin-rotational and time-reversal symmetries intact. The chiral liquid phase is characterized by a finite vector chirality without long range dipolar magnetic order. We corroborate our analytic treatment with a numerical analysis and show evidence of the chiral phase by means of the density matrix renormalization group calculations.

標題：理論セミナー：Recent Progress in a Calculation Method of Quasiparticle Spectra

日時：2017年12月1日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：大野 かおる

所属：横浜国立大学大学院工学研究院

要旨：

Photoelectron spectra represent the total energy difference between the N -electron system and the $(N \pm 1)$ -electron system, which give the basic idea of the quasiparticle (QP) energies.

Very recently, we found that the rigorous formulation involving the QP energies, the QP wave functions, and the QP equation can be applied not only to the N -electron ground state but also to any M -electron excited eigenstate [1]. Focusing on this topic, I will explain our recent achievement of the self-consistent $GW\Gamma$ calculation [2], the GW without Bethe-Salpeter equation method for photoabsorption spectra [3], and the TDGW method for excited state dynamics simulations [4]. These calculations were carried out by using the all-electron mixed basis approach (program name TOMBO), which uses both numerical atomic orbitals and plane waves [5].

[1] K. Ohno, S. Ono, and T. Isobe, *J. Chem. Phys.* 146, 084108 (2017).

[2] R. Kuwahara, Y. Noguchi, and K. Ohno, *Phys. Rev. B* 94, 121116(R) (2016).

[3] T. Isobe, R. Kuwahara, and K. Ohno, to be submitted.

[4] T. N. Pham, S. Ono, and K. Ohno, *J. Chem. Phys.* 144, 144309 (2016).

[5] S. Ono, Y. Noguchi, R. Sahara, Y. Kawazoe, and K. Ohno, *Comp. Phys. Comm* 189, 20 (2015).

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：水と氷のネットワーク構造と物性

日時：2017年12月12日(火) 午前10時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第一会議室 (A636)

講師：松本 正和

所属：岡山大学異分野基礎科学研究所

要旨：

水に物質を溶かすと何が起るか。それに答えるためには、水そのものの性質をよく知る必要がある。水は塩も砂糖も油も気体もプロトンもタンパク質も溶かしてしまうが、単にエントロピーをかせいであるだけでなく、溶質の種類に合わせて、水自体が構造を変えたり、溶質と一体化してしまったりする。そのため、溶質分子の間に奇妙な引力が働いたり、違う種類の物質を同時に溶かすと意外なことが起きたりする。さらに、物質を溶かすと、氷の結晶構造が大幅に変わり凝固点が上昇することもある。溶媒と溶質を地(背景)と図(主体)として分けてしまえない、これらのさまざまな水和現象を理解する基礎として、水の作る多様な構造と物性を紹介したい。

[1] Matsui, T., Hirata, M., Yagasaki, T., Matsumoto, M. & Tanaka, H. *J. Chem. Phys.* 147, 091101 (2017).

[2] Matsumoto, M., Yagasaki, T. & Tanaka, H. *Phys. Rev. Lett.* 115, 197801 (2015).

[3] Yagasaki, T., Matsumoto, M. & Tanaka, H. *Phys. Rev. E* 89, 020301 (2014).

[4] M. Matsumoto and H. Tanaka, *J. Phys. Chem. B*, 115, 8257 (2011).

[5] M. Matsumoto, A. Baba, and I. Ohmine, *J. Chem. Phys.* 127, 134504 (2007).

標題：理論セミナー：コニカルらせん磁性体におけるマルチフェロイックドメイン制御

日時：2017年12月15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：木村 剛

所属：東京大学新領域創成科学研究科

要旨：

コニカルらせん磁気構造を持つマルチフェロイクスにおいては、ときに自発分極と自発磁化が共存し、磁化の反転に伴って自発分極が反転するといった稀有な電気磁気結合が発現する。本講演では、コニカルらせん磁気構造を示すマルチフェロイクスとして六方晶フェライト $\text{Ba}_{1.3}\text{Sr}_{0.7}\text{CoZnFe}_{11}\text{AlO}_{22}$ 、オリビン型 Mn 酸化物 Mn_2GeO_4 などを取り上げ、円偏光共鳴軟 X 線回折や偏極中性子線回折測定により明らかとなったマルチフェロイックドメインの実空間分布やその外場応答に関する結果を紹介し、コニカルらせん磁性体における多様なドメイン（強磁性・強誘電・磁気らせん・ 180° 反強磁性ドメイン等）のスイッチに起因する電気磁気結合に関して議論する。本講演の内容は、上田大貴(阪大基礎工)、田中良和(理研 Spring-8 センター)、本田孝志(KEK 物構研)、J.S. White (PSI), M. Kenzelmann (PSI)らとの共同研究によるものである。

[1] H. Ueda, Y. Tanaka, H. Nakajima, S. Mori, K. Ohta, K. Haruki, S. Hirose, Y. Wakabayashi and T. Kimura, *Appl. Phys. Lett.* 109, 182902 (2016).

[2] T. Honda, J. S. White, A. B. Harris, L. C. Chapon, A. Fennell, B. Roessli, O. Zaharko, Y. Murakami, M. Kenzelmann, and T. Kimura, *Nat. Commun.* 8, 15457 (2017).



標題：理論セミナー：Competing orders in Dirac fermions
日時：2017年12月19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：Toshihiro SATO
所属：Universität Würzburg
要旨：

Correlated Dirac systems are currently one of the most active research areas in condensed matter physics. The topic is experimentally relevant in the context of graphene and other Dirac materials, and theoretically relevant because the corresponding low-energy field theories exhibit remarkable topological properties and are closely related to high-energy physics. We will present exact quantum Monte Carlo results for a model of Dirac fermions in 2+1 dimensions with dynamically generated, anti-commuting $SO(3)$ Néel and Z_2 Kekulé mass terms. We will provide evidence for a direct and continuous transition between the Néel and Kekulé phases. The fermions remain gapped across the transition, and our data support an emergent $SO(4)$ symmetry unifying the two order parameters. While this phase transition falls outside the Ginzburg-Landau-Wilson paradigm, the emergent $SO(4)$ invariance permits an interpretation of the transition in terms of deconfined quantum criticality [1].

References:

[1] T. Sato, M. Hohenadler, and F. F. Assaad, Phys. Rev. Lett. 119, 197203 (2017).

標題：理論セミナー：結合クラスター理論に基づいた1電子スペクトル計算
日時：2017年12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：松下 雄一郎
所属：東京大学大学院工学系研究科
要旨：

密度汎関数理論(DFT)は弱相関物質に対して適用された際に、極めて精度良く電子状態や原子構造を記述することが知られており、解析・予言の様々な面で用いられてきた。しかし、強相関電子系を代表とするいくつかの系においては定性的にも誤った結果を出す事が知られている。一方で、波動関数理論は孤立系(原子・分子系)へと適用され、DFTを超えた高精度計算がなされている。しかし、一般に波動関数理論の下では全エネルギーに対する信頼性の高い計算が可能となる一方で、エネルギー準位(1電子準位)の解析に関しては極めて限定的であった。本研究では、波動関数理論としてcoupled-cluster(CC)理論を採用し、CC理論の下で1粒子グリーン関数を構築する事により1電子スペクトルを計算し、厳密解と比較を行った。その結果、準粒子スペクトルを極めて良い精度で再現すること、さらにはサテライトピーク(共鳴準位)に関しても再現される事を見出した。本発表では、孤立原子を中心に結果を紹介する。

物性研だより第 57 巻目録 (第 1 号～第 4 号)

物性研だより第 57 巻第 1 号 2017 年 4 月

ブリージングパイロクロア磁性体における新しい量子状態の観測	益田 隆嗣	1
ホウ素単原子シート「ボロフェン」とディラックフェルミオン	Baojie Feng、松田 巖	3
スピン液体状態における熱ホール効果の発見	山下 穰	6
鉄系超伝導体 FeSe が示す特異な高圧下電子状態相図	松浦 康平、芝内 孝禎、程 金光、上床 美也	9
スパーズモデリングにより電子のさざなみを見る —走査トンネル顕微・分光法による準粒子干渉計測の高速・高精度化—	吉田 靖雄、土師 将大、長谷川 幸雄	11
国際会議 ECOSS-32 において SFV “Michel Cantarel” student grant を受賞して	高橋 文雄	14
国際会議 IVC-20 において IUVSTA-VASSCAA-Elsevier Student Award を受賞して	土師 将裕	16
第 40 回応用物理学会講演奨励賞を受賞して	笠松 秀輔	17
第 40 回応用物理学会講演奨励賞を受賞して	齋藤 成之	18
国際会議 ISUPTW2016 において Best Conference Paper Award を受賞して	玄 洪文	20
日本中性子科学会奨励賞を受賞して	左右田 稔	23
物性研に着任して	谷内 敏之	25
外国人客員所員を経験して	Sonachalam. ARUMUGAM	26
	Agustinus Agung Nugroho	27
平成 28 年度 物性研究所一般公開の報告	上床 美也	29
【物性研究所短期研究会】		
○「原子層上の活性サイトで発現する局所機能物性」の報告		36
○「走査トンネル顕微鏡による物性研究の現状と展望」の報告		41
【ISSP ワークショップ】		
○磁性・強相関電子系分野の中性子散乱研究の新展開 ～JRR-3 再稼働を見据えて～		46
【物性研究所談話会】		49
【物性研究所セミナー】		51
【物性研ニュース】		
○平成 28 年度外部資金の受入について		59
○人事異動		61
【その他】		
編集後記		
物性研だよりの購読について		

第 57 巻第 2 号 2017 年 7 月

トポロジカル絶縁体表面で高効率スピン流を生成	近藤 浩太、大谷 義近	1
なぜ高温超伝導体は界面で優れた特性を持つか？		
—銅酸化物界面で超伝導転移温度が安定に最適化される機構を解明—	三澤 貴宏	4
ゲルマニウム単原子シート「ゲルマネン」の原子配置の非対称化	深谷 有喜 松田 巖	7

国際会議 International Conference on Topological Materials Science 2017(TopoMat2017)において	
Poster Award を受賞して	肥後 友也 11
物性研に着任して	小濱 芳允 13
外国人客員所員を経験して	Ingo Salzmann 15
客員所員を経験して	溝川 貴司 17
	梅野 健 18
	中村 正明 20
【物性研究所短期研究会】	
○「光で見る・操る電子物性科学の最前線～強相関、トポロジー、低次元、ダイナミクス～」の報告	22
【物性研究所談話会】	30
【物性研究所セミナー】	33
【物性研ニュース】	
○東京大学物性研究所研究員の公募について	49
編集後記	

性研だより第 57 巻第 4 号 2018 年 1 月

ゾルーゲル変化を自ら繰り返す、アメーバのような新物質を人工的に合成	小野田 実真、吉田 亮、柴山 充弘 1
見る方向や光の偏光によって三色に変化する物質 -5d 電子系化合物が示す新たな機能性	平井 大悟郎 4
鉄系超伝導体 FeSe の硫黄置換における三次元圧力下電子相図	松浦 康平、芝内 孝禎、上床 美也 7
電子の「震え」現象と伝導度揺らぎ	中村 壮智、勝本 信吾 10
レーザー学会第 45 回定時総会レーザー学会奨励賞を受賞して	中村 卓磨 13
USD10 にて Young Researcher Poster Award を受賞	伊藤 俊 15
国際会議 Actinides2017 において Student poster award を受賞して	中村 翔太 17
国際会議 International Conference on Inelastic X-ray scattering (IXS2017)にて“POSTER PRIZE”を受賞して	横山 優一 19
J-Physics 国際会議において“Best Poster Award”を受賞して	谷口 貴紀 21
コロイドおよびポリマー科学レクチャー2017	柴山 充弘 22
物性研に着任して	酒井 明人 24
外国人客員所員を経験して	Akira Otsuki 25
平成 29 年度 物性研究所一般公開の報告	山室 修 27
【物性研究所短期研究会】	
○物性研スパコン共同利用 CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」の報告	33
【ISSP ワークショップ】	
○第 5 回伊藤国際学術研究センター会議(IIRC-5)「Frontier Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: From a Single Molecule to Catalytic Reaction」の報告	吉信 淳 36
第 62 回物性若手夏の学校開催報告	瑞慶覧長空 43
【物性研究所セミナー】	48
編集後記	

編集後記

この編集後記を書いている3月は新天地へ向かう研究室メンバーと共同研究者がありがたくも挨拶に訪ねて来てくれます。楽しかったことや辛かったことなど語り合いたいことは本当にたくさんあるのに、その日は終わりを迎え、「今後ともよろしく願いいたします」と再会を互いに期待してその背中を見送ります。また、お会いしましょう。

本号の「物性研だより」でも研究所の著しい成果や受賞がたくさん報告されています。今回は表紙の彩豊かな結晶の写真から3次元相図まで視覚に訴えるものが多いようです。また、Belousov-Zhabotinsky (BZ)反応と Zitterbewegung (ZB)をそれぞれ扱った記事もあり、講義で習った BZ と ZB を懐かしみながらその先端研究を知ることできます。本号では大盛況だった平成29年度一般公開に関する記事も山室先生のテイストで各担当者を労いながら温かく書かれており、当時の光景が目に浮かぶようです。

平成30年度も研究だけでなく社会活動でも物性研が活躍することと思います。

松田 巖

