

物性研だより

BUSSEIKEN DAYORI

第 62 卷

第 4 号

2022 年度

第一原理強相関手法により明らかにした
量子スピン液体候補物質Pd(dmit)₂ 塩の性質

高精度ミラーと計算を組み合わせた軟X線顕微鏡を開発
ーラベルフリーで細胞内の微細構造を50nmの分解能で可視化ー

北海道の砂白金から発見された新種の鉱物、苫前鉱

スキルミオン人工知能素子
ースキルミオンを用いた画像認識ー

FFLO超伝導が創る空間的異方性

ノンコリニア反強磁性体におけるピエゾ磁気効果による
異常ホール効果の符号スイッチングの観測



東京大学 物性研究所

THE INSTITUTE FOR SOLID STATE PHYSICS
THE UNIVERSITY OF TOKYO

Copyright ©2022 Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

contents

- 1 第一原理強相関手法により明らかにした量子スピン液体候補物質 Pd(dmit)_2 塩の性質
井戸 康太、吉見 一慶

- 4 高精度ミラーと計算を組み合わせた軟 X 線顕微鏡を開発
ーラベルフリーで細胞内の微細構造を 50nm の分解能で可視化ー
木村 隆志、竹尾 陽子

- 6 北海道の砂白金から発見された新種の鉱物、苫前鉱
浜根 大輔

- 10 スキルミオン人工知能素子 ースキルミオンを用いた画像認識ー
横内 智行、大谷 義近

- 13 FFLO 超伝導が創る空間的異方性
今城 周作

- 16 ノンコリニア反強磁性体におけるピエゾ磁気効果による異常ホール効果の
符号スイッチングの観測
肥後 友也、Muhammad Ikhlas、中辻 知

- 19 「テラヘルツ科学の最先端 VIII」最優秀若手研究者賞を受賞して
室谷 悠太

- 21 MagnEFi conference 2022 の Prize of Best Scientific Poster を受賞して
石川 卓門

- 23 外国人客員所員を経験して
Oliver Portugall

- 26 令和 4 年度 物性研究所一般公開の報告
川島 直輝

【物性研究所短期研究会】

- 30 ○理論タンパク質物性科学の最前線：理論と実験との密な協働

【物性研究所談話会】

【物性研究所セミナー】

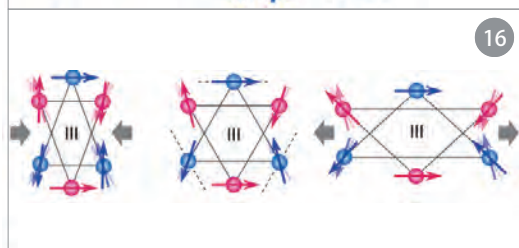
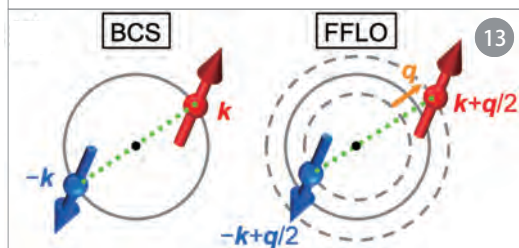
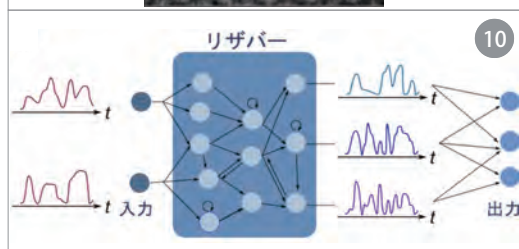
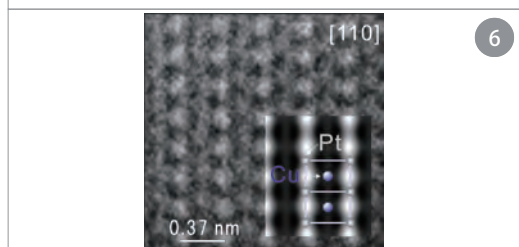
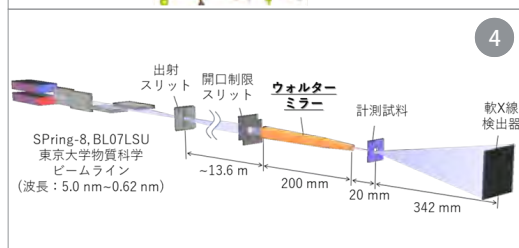
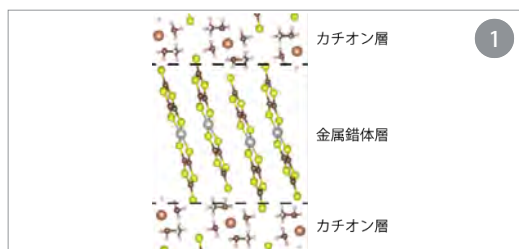
【物性研ニュース】

- 45 ○東京大学物性研究所人事異動一覧

- 46 物性研だより第 62 巻目録(第 1 号～第 4 号)

編集後記

物性研だよりの購読について



第一原理強相関手法により明らかにした量子スピ ン液体候補物質 Pd(dmit)_2 塩の性質

物質設計評価施設 大型計算機室 井戸 康太、吉見 一慶

1. はじめに

我々が暮らしている社会は、金属や半導体・絶縁体などの様々な物質科学研究の上で成り立っている。こうした物質の性質を理論的に解明し、より高性能な新物質を提案するためには、物質中の結晶構造の情報から電子構造を理解できる第一原理計算が有用である。第一原理計算手法として最も確立している手法として、密度汎関数理論(DFT)が挙げられる。DFT では、電子間相互作用を一体の局所ポテンシャルに効率よく近似することで、電子の多体問題を一体問題として表現している。近年のコンピュータ性能の向上やソフトウェア開発の進展に伴い、DFT は理論家だけでなく実験家にも利用されてきている。しかし、電子の多体相互作用を近似的に取り扱っているため、高温超伝導体や量子スピ液体などの量子もつれの強い強相関物質へDFT を適用すると定性的にも間違った結果を得てしまう。そのため、強相関物質にも適用できる汎用的な第一原理計算手法は、現在も世界中で開発が進んでいる。

第一原理強相関手法の一つとして、階層的な第一原理強相関電子状態計算手法(MACE)が挙げられる[1]。本手法では、DFT により得られた大域的な電子構造をもとに、フェルミエネルギー付近の低エネルギー自由度を記述する有効ハミルトニアンを導出する。この有効ハミルトニアンをDFT を超えて高精度に電子相関を取り込める計算手法で解析することで、強相関物質の電子状態や性質を明らかに

することができる。この手法は鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体に適用されており、それぞれの実験相図を再現したうえで、超伝導発現の微視的機構を明らかにしてきた[2, 3]。

MACE のアプローチは、高温超伝導体だけでなくスピ液体が発現すると考えられている有機固体にも適用され始めている。例えば、有機固体の代表例として、カチオン分子 X と Pd(dmit)_2 分子で構成される有機固体 $\beta'-X[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ が挙げられる[4]。 $\beta'-X[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ はカチオン分子 X により様々な基底状態を示すことで知られており、特に $X=\text{EtMe}_3\text{Sb}$ の場合には極低温まで磁性を示さない絶縁体であることからスピ液体候補物質としても注目されている[5]。しかしながら、スピギャップの有無などといった基本的な性質については未だ議論が続いていた。そこで我々は、上述の MACE を用いて、5 つの典型的な有機固体 $\beta'-X[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ を第一原理的に解析することで、 $X=\text{EtMe}_3\text{Sb}$ の場合に量子スピ液体が基底状態となるのか、そしてその量子スピ液体はどのような性質を示すのかを明らかにするために、本研究を行なった[6, 7]。

2. 研究結果

$\beta'-X[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ の低エネルギー有効ハミルトニアンは、最局在ワニエ関数法および制限乱雑位相近似により第一原理的に導出した。導出されたハミルトニアンは、図 1 のように金属錯体 $[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ の二量体が二次元三角格子状に

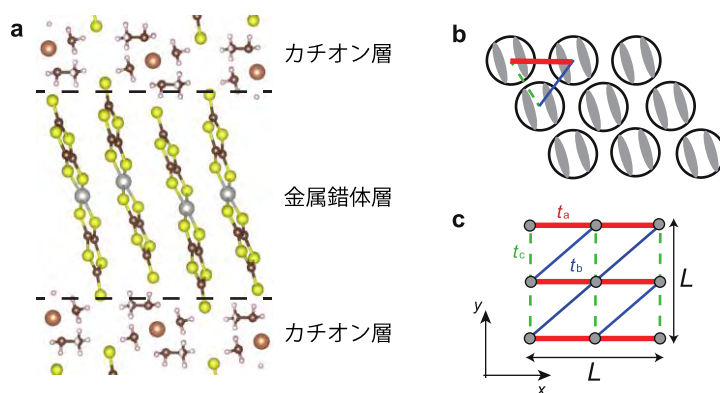


図 1: 有機固体 $\beta'-\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd(dmit)}_2]_2$ の結晶構造と金属錯体層の模式図[6, 7]。パネル a の結晶構造図は、結晶構造ファイル[8]を可視化ソフトウェア VESTA[9]を利用して作成した。金属錯体層では、パネル b のように、三角格子を組んでいる灰色の Pd(dmit)_2 の二量体(黒丸)に電子が束縛されている。計算ではパネル c のように正方格子として取り扱っている。

計算により得られた磁性相とスピン液体相のエネルギー差を幾何学的フラストレーションの強さでプロットした結果を図 3 に示す。フラストレーションの強さは、2 つの移動積分値の差 $t_c - t_b$ で評価している。この差が小さくなりフラストレーションが強くなると一次元的な異方性を持つ三角格子に近づく。我々の結果は、フラストレーションが強くなることで、スピン液体相と磁性相のエネルギー差が縮まり、カチオン分子が EtMe_3Sb ではスピン液体相が最安定になることを明らかにした。この数値結果は、実験で測定されたネール温度の振る舞いとも整合する(図 3 の下パネルを参照)。このように、我々は 5 つの典型的な β' - $\text{X}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ の実験相図を第一原理的に再現することに成功した。

さらに平均場的なスペクトルを解析してみたところ、スペクトル形状が二次元的で異方性のある Dirac 的な分散を持つことがわかった(図 5 を参照)。スペクトルにおけるギャップレス波数点の位置を解析することにより、量子スピン液体で観測されたスピニングャップレス励起は、スピンの分断化することにより創発したスピノンと呼ばれるフェルミ粒子の複合励起として解釈できることがわかった。以上の結果は、スピン液体候補物質 β' -EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ では、一次元性と二次元性の両面を秘めた特異な量子スピン液体が実現していることを示唆している。

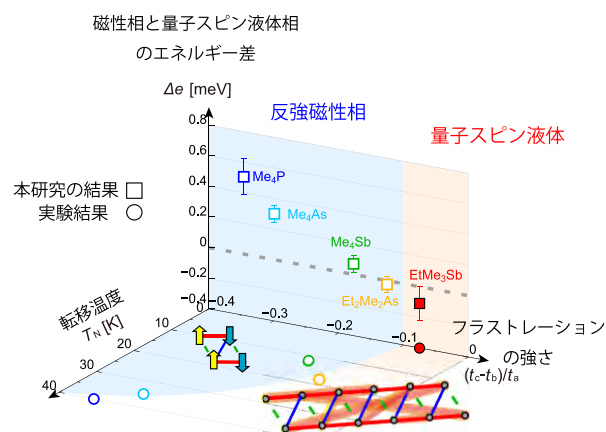


図 3 : 有機固体 β' -X[Pd(dmit)₂]₂ の相図[6, 7]。縦のパネルでは、本研究で計算した量子スピン液体相と磁性相のエネルギー差をフラストレーションの強さでプロットしている。下のパネルでは、実験で観測されたネール温度をフラストレーションの強さでプロットしている。青色、オレンジで塗られた領域は、それぞれ実験で観測された磁性相と量子スピン液体相が実現する領域を簡易的に表している。

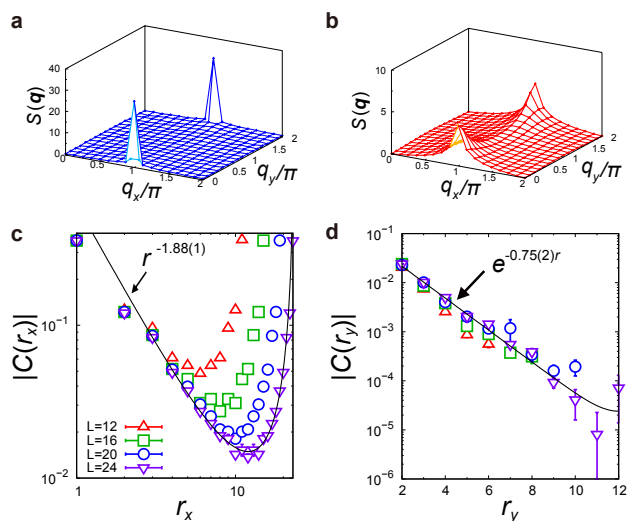


図 4: 基底状態のスピン構造因子とスピン相関関数[6]。パネル **a**, **b** は、それぞれ $X=\text{Me}_4\text{P}$, $X=\text{EtMe}_3\text{Sb}$ でのスピン構造因子を表す。パネル **c**, **d** では、それぞれ $X=\text{EtMe}_3\text{Sb}$ での x 軸方向および y 軸方向のスピン相関関数の絶対値をプロットしている。

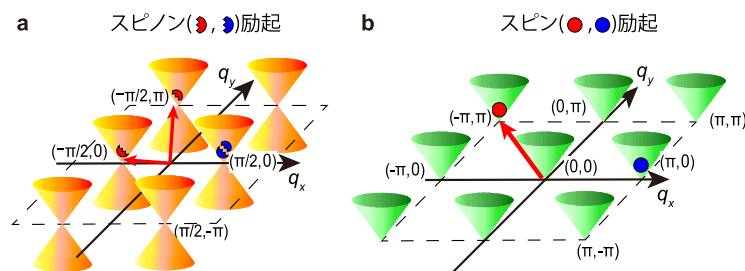


図 5：基底状態から予測したスピノン(パネル a)とスピン(パネル b)の励起構造の模式図[6, 7]。実験では観測できないスピノン(ギザギザ模様のある半円)の複合励起が、実験で観測可能なスピン励起を生み出している。

3. 終わりに

本研究では、人工ニューラルネットワークを活用した強相関第一原理計算により、 β' -X[Pd(dmit) $_2$] $_2$ の低エネルギー有効ハミルトニアンを解析した。これまでの研究でも、フラストレーションによる量子スピン液体の安定化が議論されてきたが、複数の β' -X[Pd(dmit) $_2$] $_2$ を対象とした網羅的な第一原理計算をすることで、一次元的になるようなフラストレーションが量子スピン液体を実現させていることをより明確にした。さらに、量子スピン液体の安定性だけでなく、実験での基底状態を再現できる量子多体ソルバーを用いることで、 β' -EtMe $_3$ Sb[Pd(dmit) $_2$] $_2$ の有効ハミルトニアンで発現する量子スピン液体の性質を明らかにした。今後は、本研究のように、他のスピン液体候補物質や高温超伝導体、未だ合成されていない仮想物質へ MACE を網羅的に適用することで、量子もつれの強い量子物質で発現する特異な性質の微視的機構を包括的に理解するだけでなく、新奇機能物性を有する強相関物質をデザインしていくことも期待される。

こうした MACE による解析をスムーズに実行するために、物性研究所のソフトウェア開発・高度化プロジェクトによる支援のもと、有効ハミルトニアンを導出する RESPACK[12]、有効ハミルトニアンを解析できる H Φ [13]や mVMC[14]といったソフトウェアの整備が進んでいる。全てオープンソースのソフトウェアとして公開されているため、無料で利用することができる。また、Linux システムである MateriApps LIVE![15]や物性研究所の提供する共同利用スーパーコンピュータにプリインストールされているため、これらの環境ではインストール作業をせずに利用できる。読者の中に興味を持たれた方がいたら、ぜひ一度試してみていただきたい。

4. 謝辞

本研究は、三澤 貴宏氏(北京量子信息科学研究院 副研究員)、今田 正俊氏(早稲田大 研究院教授/ 豊田理研 フェ

ロー)との共同研究として実施した。本研究では、東京大学物性研究所「Ohtaka」や東京大学情報基盤センター「Oakbridge-CX」、理化学研究所「富岳」といったスーパーコンピュータを計算資源として利用した。本研究は日本学術振興会 科学研究費助成事業(16H06345, 19K14645)と文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学」(JPMXP1020200104)の一環として実施された。また、本研究の一部は、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け実施した(課題番号：hp200132, hp210163)。

5. 参考文献

- [1] M. Imada and T. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 112001 (2010).
- [2] T. Misawa and M. Imada, Nat. Commun. **5**, 5738 (2014).
- [3] T. Ohgoe et al., Phys. Rev. B **101**, 045124 (2020).
- [4] T. Misawa, K. Yoshimi, and T. Tsumuraya, Phys. Rev. Research **2**, 032072(R) (2020).
- [5] K. Kanoda and R. Kato, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **2**, 167 (2011).
- [6] K. Ido, K. Yoshimi, T. Misawa and M. Imada, npj Quantum Materials **7**, 48 (2022).
- [7] <https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/news2.html?pid=15512>
- [8] R. Kato and C. Hengbo, Crystals **2**, 861 (2012).
- [9] K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272 (2011).
- [10] G. Carleo and M. Troyer, Science **355**, 602 (2017).
- [11] Y. Nomura et al., Phys. Rev. B **96**, 205152 (2017).
- [12] <https://sites.google.com/view/kazuma7k6r>
- [13] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/hphi/>
- [14] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mvmc/>
- [15] <https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

高精度ミ ーラベルフ

軌道放射物性研究施設 木村 隆志、竹尾 陽子

高い分解能とさまざまな物性分析技術を持つ X 線顕微イメージングは、生物学や材料科学など幅広い領域において応用が行われている。中でも可視光と比較して 2~3 桁程度短い波長を持つ軟 X 線は、細胞や高分子材料といった軽元素が多く含まれる不均一な構造の物性を調べるに特に適しており、例えば X 線吸収分光と組み合わせ、磁性細菌中ナノ粒子の化学状態マッピング[1]や、Li イオン電池材料の劣化メカニズムの可視化[2]といった成果も報告されており、電子顕微鏡による観察では試料の厚さや損傷が問題になる対象に対して大きな有用性が見出されている。

一方で、軟X線はその極端に短い波長のため、可視光と同じようなレンズを用いた顕微鏡を構築することが困難であり、これまではゾーンプレート[3]と言われる、微細パターンを利用した特殊な光学素子による軟X線顕微鏡の開発が広く行われてきた。しかし、ゾーンプレートは波長に依存して焦点距離が変わる色収差という性質を持っており、物質の持つさまざまな元素に対応した軟X線のイメージングを行うには大きな困難が伴っていた。また、波長が短いということは、それだけ光学素子に求められる作製精度も高くなることを意味しており、この作製精度も軟X線顕微鏡の大きな問題として存在していた。

そこで今回の研究[4]では、ウォルターミラーと呼ばれる高精度な光学素子を導入した新たな軟X線顕微鏡の開発に取り組んだ。このウォルターミラーは非球面形状表面における軟X線の全反射現象を利用して集光を行うため、従来問題となっていた色収差が原理的に存在しないため、様々な元素の吸収端に対応した分光計測を行う上で最適な光学素子である。さらに加えて、研究グループではこのウォルターミラーを導入した軟X線顕微鏡に、タイコグラフィ法[5]と呼ばれる新たなイメージング技術を組み合わせることで、光学素子の作製精度に影響されない高い分解能の実現を目指した。タイコグラフィ法は近年研究がめざましく進展している新しいイメージング技術で、干渉性の高い光を試料に照射した時に得られる回折パターンを計算機により再構成することで、非常に高い分解能と感度を実現することができる。

図 1 に開発した軟 X 線顕微鏡の写真とその概略図を示す。本顕微鏡は大型放射光施設 SPring-8 の東京大学物質科学ビームライン BL07LSU に構築した。本ビームラインでは波長 5.0 nm~0.62 nm の軟 X 線を利用可能であり、写真中オレンジ色の筒状の部品が今回軟 X 線顕微鏡用に新たに開発した 200 mm 長のウォルターミラーになる。開発した顕微鏡の分解能をテストパターンにより評価したところ、軟 X 線の波長をさまざまに変化させても、50 nm 程度の分解能で同様の観察が可能であることを確認した。

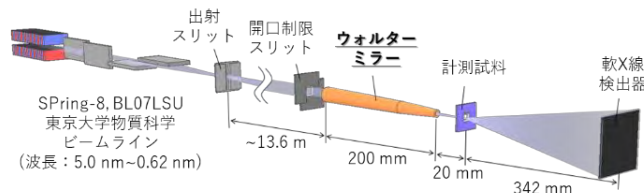


図1 開発した軟X線顕微鏡の配置(上)と計測装置の内部写真(下)。写真中でのオレンジ色の筒型部品が新たに開発した軟X線全反射ウォルターミラー。

また本顕微鏡の応用例を示すために、複数波長の軟X線での細胞試料の計測を行った。試料には、チャイニーズハムスター卵巣がん細胞を 200 nm の窒化ケイ素薄膜上で培養した後に、パラホルムアルデヒドで化学固定処理を行ったものを利用している。細胞の厚さはおよそ 5 μm であり、電子顕微鏡によって内部の透過観察を行うことが一般的に困難な厚さである。軟X線は物質と程よく相互作用するため、こうした分厚い試料を薄片化せずそのまま観察することが可能である。

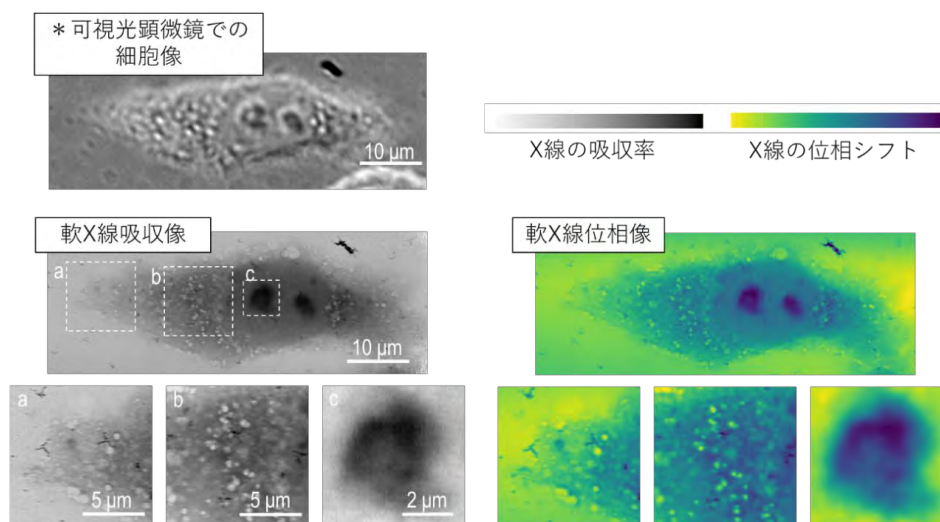


図 2 2.1 nm の波長の軟 X 線で計測した細胞像。下段左が軟 X 線の吸収率、下段右が位相シフトによるイメージング結果。軟 X 線吸収像中の点線で囲った領域(a,b,c)を、下部にそれぞれ拡大して示している。

図 2 に軟 X 線で観察した細胞の画像の代表例を示す。タイコグラフィ法では試料の X 線に対する吸収率だけでなく、位相のシフト量も定量的に求めることが可能である。こうした吸収や位相のイメージングによって、核小体やミトコンドリア、小胞体と想定されるさまざまな細胞内の構造を高分解能に捉えることに成功した。また、軟 X 線の各波長でのイメージング結果に、透過像と位相像に大きな違いがあることが分かった。X 線領域において位相像は感度の高い計測を行うことができるため、細胞のような透過性の高い試料を計測する場合の本軟 X 線顕微鏡の大きな長所になる。

今回の細胞試料のイメージングは、炭素や窒素、酸素とよく反応する軟 X 線の波長域を跨いで計測を行っており、今後軟 X 線の吸収分光分析と組み合わせることで、細胞中の元素分布だけでなく、タンパク質や脂質、核酸、糖といったさまざまな分子の分布をラベルフリーで捉えることが可能になる。こうした元素選択的な高分解能イメージング技術は、現在広く利用されている可視光蛍光顕微鏡では捉えることの難しい低分子などの分析に力を発揮するものと期待される。

また、軟 X 線顕微鏡は物質中の電子状態を調べることによって物性研究にも力を発揮する。今後、装置の改良による 10 nm 分解能の実現も目指しており、本軟 X 線顕微鏡の特性と合わせて、スピントロニクスなどを活用した次世代デバイスの動作環境下で評価などにも取り組んでいく計画である。

[参考文献]

- [1] X. Zhu, A. P. Hitchcock, D. A. Bazylinski, P. Denes, J. Joseph, U. Lins, S. Marchesini, H. W. Shiu, T. Tyliczszak, and D. A. Shapiro, "Measuring spectroscopy and magnetism of extracted and intracellular magnetosomes using soft X-ray ptychography," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 113, E8219–E8227 (2016).
- [2] T. Sun, G. Sun, F. Yu, Y. Mao, R. Tai, X. Zhang, G. Shao, Z. Wang, J. Wang, and J. Zhou, "Soft X-ray ptychography chemical imaging of degradation in a composite surface-reconstructed Li-rich cathode," *ACS Nano* 15, 1475–1485 (2021).
- [3] B. Rösner, S. Finizio, F. Koch, F. Döring, V. A. Guzenko, M. Langer, E. Kirk, B. Watts, M. Meyer, J. Loroña Ornelas, A. Späth, S. Stanesco, S. Swaraj, R. Belkhou, T. Ishikawa, T. F. Keller, B. Gross, M. Poggio, R. H. Fink, J. Raabe, A. Kleibert, and C. David, "Soft X-ray microscopy with 7 nm resolution," *Optica* 7, 1602 (2020).
- [4] T. Kimura, Y. Takeo, K. Sakurai, N. Furuya, S. Egawa, G. Yamaguchi, Y. Matsuzawa, T. Kume, H. Mimura, M. Shimura, H. Ohashi, I. Matsuda, and Y. Harada, "Soft X-ray ptychography system using a Wolter mirror for achromatic illumination optics," *Opt. Express* 30, 26220 (2022).
- [5] F. Pfeiffer, "X-ray ptychography," *Nat. Photonics* 12, 9–17 (2018).

北海道の

物質設計評估施設電子顕微鏡室 浜根 大輔

北海道から発見された新種の鉱物である苫前鉱について2022年9月7日付でプレスリリースを行った。この研究活動は記載鉱物学にあたり、それは物質科学の一種でもあるため、試料を得ることが研究の具体的な出発点となる。ただ、試料を得るにあたっては地域の歴史文化や人間活動、または人間臭さが障壁になることがあり、体力や採集技術が問われることもある。ここでは科学論文には記されることのない歴史文化的な背景から紹介しようと思う。苫前鉱は砂白金から発見された鉱物であるため、まずは砂白金のことから話を始めたい。そして話はやがて物性研の目の前にある柏の葉公園にたどり着く。そこでは砂白金ありきの戦闘機がかつて開発されつつあった。

砂白金(さはつきん、すなはつきん)とは「漂砂として堆積した、白金族元素を主成分とする鉱物の総称」で、モノ自体は写真からわかるように銀白色のちいさな粒子である(図 1)。日本で砂白金が発見された(記録された)のは近代に入ろうかという時代であり、明治 23 年(1890 年)に北海道の夕張川および空知川において砂金に混じって見つかったと伝わる[1]。そして明治 28 年ごろまでにはその砂白金がイリジウム-オスミウム合金であることが判明するもの

の、その当時は砂白金には用途がなかった。この時代はまだ砂金のみが重宝され、それゆえに砂白金が混入した場合は買い手がつかないか買いたたかれた。しかし、北海道で砂金を採っていると砂白金もまた同時に採れてしまう。そのため採掘人は夜な夜な囲炉裏の前で砂白金を指で撥ねることが習慣となっていた[2]。この当時、砂白金は苦勞して採った価値ある砂金を汚す厄介者であり、ゴミ同然であった。

北海道の砂白金の大多数を占めるイリジウム-オスミウム合金は通称でイリドスミンと呼ばれ、耐摩耗性に優れる。そして、その特徴を生かした製品、万年筆が明治の終わりと大正の初め頃に登場した(図 2)。万年筆のペンポイントとして砂白金(=イリドスミン)は最適な素材で、この頃から砂白金に商品価値が生じて積極的に採掘されるようになっていく。一方で、砂白金は大きさや形がバラバラなために天然物をそのまま利用するやりかたは歩留まりが悪い。万年筆の量産には砂白金を溶かして小球に加工する技術もまた必要であろう。そしてある時、岡田陽と並木良輔は加工のためにライムライトを思いついた。ライムライトは酸水素炎で石灰を強熱する際に生じる鮮烈な白色光を指し、舞台照明として用いられていた。酸水素炎の温度は



図1 北海道留萌管内で得られた砂白金(左右3cm)

2800℃にも達するため純粋なオスミウムでもない限りは溶かすことができる。二人は技術を習得するために写真屋を装って映写技師に師事したという話が伝わっている[3]。結果的に彼らはペンポイントに適した良質な小球の量産を可能にし、並木は後に並木製作所(現：PILOT 社)を設立して北海道産砂白金を使った国産万年筆の販売を始めた。今ではプラズマ溶解でペンポイントが作られている。

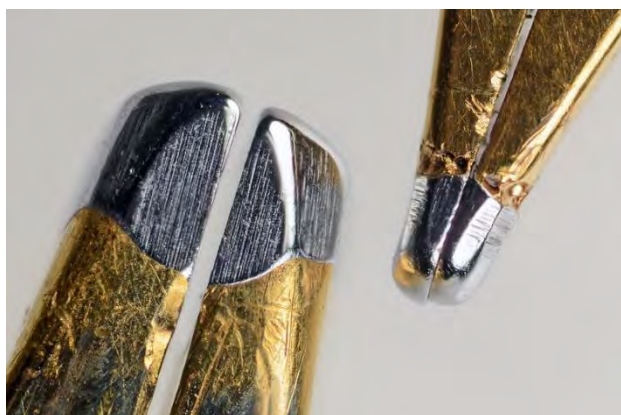


図2 万年筆のペン先。ペンポイントは今では合成で作られており、そのために配合はメーカーごとに個性がある。いろいろ調べたところ、あるメーカーの製品は北海道産の砂白金と非常によく似た組成ばかりで、そこにはこだわりが感じられた。

国産万年筆が普及し始めたころの北海道では島田千代松が頭角を現し、砂白金について現場からの買い付けと道外への販売を独占するようになっている。島田は自身もかつては採掘人であったため同僚の性質をたいへん良く理解していた。上で紹介したように、砂金を狙う採掘人は囲炉裏端で砂白金を選別・廃棄する。島田は買い付けのついでに採掘人の住居跡も探し歩き、その囲炉裏の灰を集めて砂白金をなんと効率よく回収したのだった[2]。賢く機先を制した島田は大きな成功を収め、自らを「イリジウム王」と称した。その称号は北海道産砂白金の主成分であるイリジウムにちなんでいる。

時代は下り、昭和12年(1937年)の日華事変を契機として昭和15年までには民間への砂白金の提供は止まる。そして、戦前では個人操業の域を出なかった砂白金の採掘は戦時下では国策事業として大規模に行われるようになっており、昭和17-20年(1942-1945年)の期間には延べ85万人もが動員されている[3]。これは国策事業だったことから北海道帝国大学では自ら演習林を解放して職員を採掘に当たらせた。そして、河床は数メートルも掘り下げられ、砂白金は本当に根こそぎ回収されている。なぜそこまでしたのか。実はこの時代、砂白金は万年筆どころではなく重要な軍事物資になっていた。



図3 陽春の柏の葉公園。この場はかつて軍用飛行場であり、戦局を覆しうるロケット戦闘機が開発されつつあった。

旧日本軍が砂白金を求めた理由のひとつに秋水(しゅうすい)というロケット戦闘機が大きく関係している。秋水はアメリカのB-29爆撃機を圧倒的に優位な立場から確実に撃墜できる決定的な戦闘機となるはずだった。私たちが勤務する東京大学柏キャンパスに道路を挟んで隣接する柏の葉公園(図3)。この公園はかつての柏飛行場の跡地に作られており、そこは秋水の基地でもあった。近隣の花野井には秋水の燃料庫跡が今も残されている。その燃料はメタノール、高濃度過酸化水素、ヒドラジン。当時は高濃度過酸化水素の生成にプラチナが必要で、戦時下においてそれを国産でまかなうしかなかった。そして、その原料として北海道の砂白金が用いられたのだった。そのための乱獲であったが、残念なことに北海道の砂白金はプラチナの含有量が少ない[4]。砂白金はやみくもに消費しつくされたあげく、ついに秋水は完成に至らなかった。そして終戦と共に砂白金の開拓史も終焉を迎える。産業用途の白金族元素は、以降は輸入品が使用されている。

このように戦時下の乱獲が主な要因となって北海道の砂白金は姿を消した。それでも少量ならまだ産出するだろうが、昔も今も採掘人は産地を秘匿する。産地を隠したい採掘人の気持ちと公開が前提の研究活動に折り合いをつけることは難しく、試料を確保することが砂白金研究の入り口にして最大の関門となっている。そうした実状もあってか日本では砂白金の研究例が世界に比べると極端に少ない。一例として、白金族元素を含む鉱物は世界で160種ほど知られているが、私が手を付けた時点で北海道から産出が確認されていたのは15種ほどでしかなかった。世界の砂白金産地と北海道の地質環境を考慮してもこれだけ大きな差があることはむしろ不自然で、北海道だけ種類が極端に少ない理由は調査不足としか思えない。つまり、自国で産出

砂白金の代表的な産地は北海道の中軸線上に分布している。そのため戦時中は中軸線上にある砂白金がとことん掘り抜かれ、今さらそこを訪ねても採集は難しい。しかし裏を返せば他の場所は乱獲を免れた可能性がある。そこで、北海道の地形や地質を振り返ってみると、北海道の中軸線上、その北部には天塩山地がそびえている。そして、天塩山地から西側の留萌管内(天塩町、遠別町、初山別村、羽幌町、苫前町、小平町、苫前市、増毛町)の大部分は、実は天塩山地からの土砂が堆積してできた地層である。砂白金は漂砂であるためその動きも土砂と連動する。それを考慮するとどうだろう。かつて天塩山地にあった砂白金は今となっては留萌管内に眠っているはずである。論文の共著者になってもらった斎藤勝幸氏はそうしたことを知ってか知らずか留萌管内で砂白金の新しい産地をいくつも開拓していた。



現代の採掘人である斎藤氏とは縁あって知り合った。そこから交渉を進め、いくつかの産地を案内してもらう話がまとまった。その一つが苫前町の海岸であり、緩やかな海岸段丘を流れる小さな水路には砂金と砂白金が散在しているのが見てとれた(図 4)。砂金や砂白金を採集する場合はこういった目に見える粒子を拾うほか、パンニング皿を用いた比重選鉱で回収する。一般的なパンニング皿は黒いプラスチック製で、見込みの一部には底から口縁に向かって細かいステップが設けられている。パンニング皿に土砂を入れ、水中で皿を前後左右に小刻みにゆする。すると、ブラジルナッツ効果によって大きな礫が表層に浮き上がって

こうして北海道留萌管内を中心として、南北に 70km、東西に 30km にまたがった範囲で現地調査と採集を行い、苫前町の海岸を含めて計 8 カ所から得られた砂白金を研究に用いた。そして、白金族元素を主成分とする鉱物は 40 種以上が見つかった。ひとつの地域から 40 種も見つかるというのは実は世界でも稀なことで、北海道の砂白金は単純ではなくむしろ複雑で多様であることをまず明らかにすることができた。またこのとき苫前海岸から見つかった未命名種のひとつが、苫前鉱(とままえこう、学名: Tomamaeite)として国際鉱物学連合の新鉱物・鉱物・命名委員会から新種の認定を受けることになった。学名は発見地である苫前町にちなんで名づけ、苫前(とままえ)についてはアイヌ語で「トマ・オマ・イ(エゾエンゴサクの・ある・ところ)」が由来とされている。エゾエンゴサクとは北海道の森に春の訪れを告げるべく咲く、青い可憐な花のことである。アイヌの人々はそれをトマと呼んだ。

Age Group	Percentage
18-24	12%
25-34	10%
35-44	8%
45-54	6%
55-64	4%
65+	1%

かし、天然での苦前鉱の生成場は限定されており、生成に最適な環境が持続したのも地質学的時間としてはほんの一瞬の事だったと考えられる。そのためか苦前鉱は天然ではなかなか姿を現さない。出現したとして、それは数十 μm 以下の微細な粒子に過ぎず、ほかの白金族鉱物の包有物としてわずかに存在するだけである。一般に、その程度の存在度でかつ微細な物質を検出して同定することはたいへん難しい。しかし、それができるのが電子顕微鏡という装置であり、私の勤務するこの場合は電子顕微鏡室である。果たして無事に苦前鉱という実体を鉱物学的に立証し、新種として確立することができたのだ。学術的な詳細は論文にゆずりたい[5]。

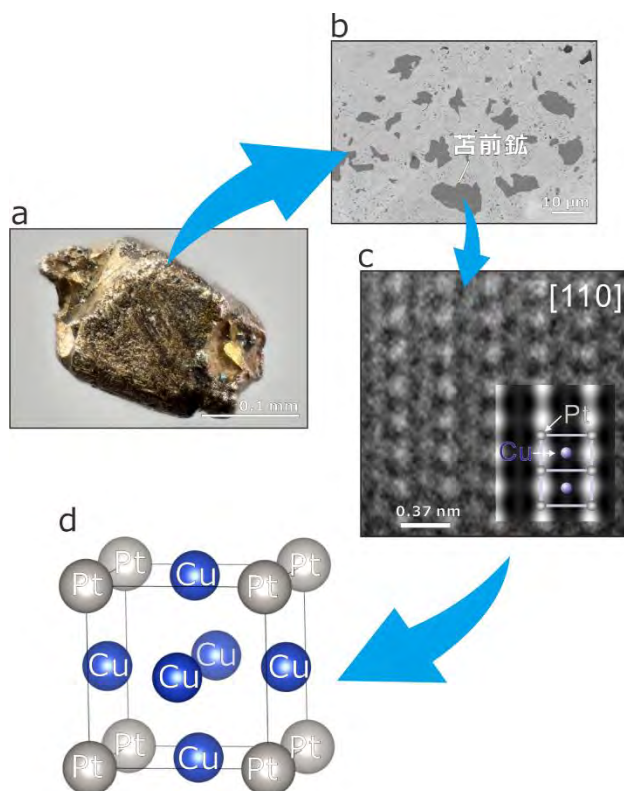


図 6 苦前鉱を含む砂白金(a)、苦前鉱が密集する箇所の走査型電子顕微鏡写真(b)、苦前鉱の透過型電子顕微鏡写真(c)とそのシミュレーション像(c インセット)、および苦前鉱の結晶構造(d)。苦前鉱は砂白金(a)を構成する鉱物の一つで、最大で 20 μm 程度の不定形な微細粒子として含まれており (b)、透過型電子顕微鏡を用いて主成分であるプラチナ(Pt)と銅(Cu)の配列が観察された(c)。その結晶構造はサイコロのような立方体の隅にプラチナ原子を置き、面の中央に銅原子を置いた姿となる(d)。

苦前町を南北に挟む小平町(南)と羽幌町(北)はアンモナイトの化石が産出することで古くから愛好家にはよく知られていた。ところがその間にある苦前町は化石についてはあまり振るわなかったようで、苦前町の教育委員会を訪ね

て中の人たちと言葉を交わした時も「小平町と羽幌町には化石があつてうらやましい、苦前町には何もない」と言われたことを覚えている。しかし、このたび新種の鉱物(=新鉱物)に苦前町の名が刻まれたということで、「苦前町には新鉱物があるのだ」と胸を張って言ってもらえるようになったらいいなと思っている。

引用文献

- [1] 松本彬(1928)北海道に於ける砂金及砂白金に就て. 日本鑛業會誌, 44, 737-745.
- [2] 北村順次郎 (1977) 土別の砂金掘り物語 及川善之進翁のこと. 続. 土別よもやま話, 土別郷土研究会, pp.192(p.89-102)
- [3] 弥永芳子 (2006) 砂白金～その歴史と科学～. 文葉社, pp.233.
- [4] 鈴木醇 (1950) 北海道の砂白金鉱床. 北海道地質要報, 14, 1-41.
- [5] Nishio-Hamane D., Saito K. (2022) Platinum-group minerals in the placer deposit in northwestern Hokkaido, Japan: description of a new mineral, tomamaeite. *Journal of Mineralogical and Petrological Sciences*, 117, 009.

スキルミオン人工知能素子

—スキルミオンを用いた画像認識—

東京大学総合文化研究科 横内 智行
物性研究所ナノスケール物性研究部門 大谷 義近

研究背景

近年、人工ニューラルネットワークモデルを用いた機械学習が画像認識や機械翻訳などで高い性能を示すことが明らかになり、大きな注目を集めている。一方で、人工ニューラルネットワークモデルを従来型の演算素子で実行する際の大きな消費電力への対策は喫緊の課題となっている。また、従来の演算素子は微細化の限界に近づいており、これ以上の集積化・高性能化が難しいという問題もある。そこで近年、人工ニューラルネットワークモデルの実行に特化した「人工知能素子(ニューロモルフィック素子)」の研究が盛んに行われており、これまでにさまざまな人工知能素子が提唱されてきている。その中の一つに、物理リザバー計算素子がある[1]。リザバー計算とは、ニューラルネットワークの一種である。通常のニューラルネットワークでは、ネットワーク内の全ての重みを最適化するのに対し、リザバー計算では、出力の重みのみを最適化し、出力以外の部分(リザバー)は、固定した重みで入力信号を変換する役割を担っている(図 1a)。ある物理系に信号を入力した際の応答が、リザバー部における入力信号の変換と同じ振る舞いを示すことがある。したがって、リザバーを物理系で代用することが可能であり、そのようなものを物理リザバーと呼ぶ(図 1b)。

これまで物理リザバーとして、様々な物理系が注目を集めてきた。その中の一つに、スキルミオンを用いたものがある[2]。スキルミオンとは、粒子状のトポロジカルスピン構造である[3]。特に、スキルミオンは従来のスピン構造に比べ低消費電力で操作が可能であり、小さいものでは直径が数ナノメートルである。したがって、スキルミオンを人工知能素子に用いることで、低消費電力かつ高集積・高性能な人工知能素子の実現が期待されている。しかし、これまでスキルミオン物理リザバー素子の性能は実験的には十分には調べられていなかった。

実験結果

本研究では、磁場誘起のスキルミオンダイナミクスに基づく物理リザバー素子を作成し、その性能を詳細に調べた[4]。

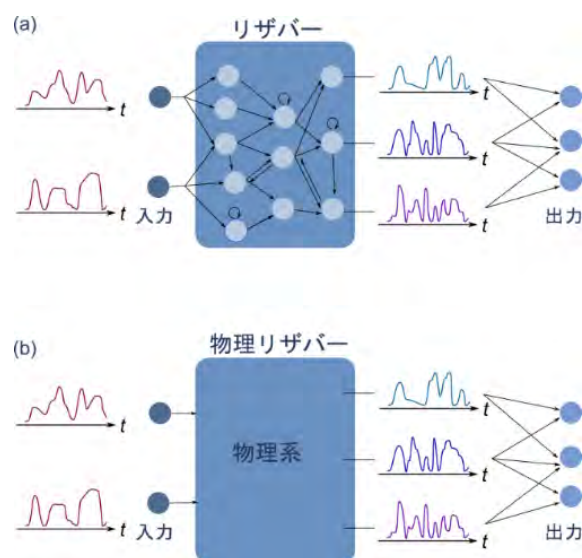


図 1 本研究の概念図 (a)リザバー計算の概念図 (b) 物理リザバーの概念図。図(a)のリザバーを物理系で置き換えたものが物理リザバーである。本研究では、物理系にスキルミオンを用いた。

スキルミオンには磁場をかけると、大きさが変化したり、生成・消失したりして変形するというダイナミクスが生じる。まず我々は、この磁場によるスキルミオンダイナミクスが物理リザバーに要求される、①入力信号を非線形に変換し出力する性質や②出力が現在の入力だけでなく過去の入力にも依存するという性質を持っていることを明らかにした。最初に、スキルミオンが形成される白金(Pt)/コバルト(Co)/イリジウム(Ir)積層薄膜を成膜し、十字状の形に加工した。そして、この十字状の素子を並列に接続することで、スキルミオン物理リザバー素子を作製した(図 2)。このスキルミオン物理リザバー素子では、入力が磁場、出力が磁化の値となる。このとき磁化の値はスキルミオンの状態を反映する。時間変動する外部磁場をかけたときのスキルミオンの状態と磁化の値を、それぞれ磁気構造を観察できるカー頭微鏡と磁化の値を反映する異常ホール効果を用いて、詳細に調べた。その結果、外部磁化に誘起されたスキルミオンダイナミクスによる磁化の値の変化が、入力した磁場に対して非線形であること、現在の入力だけでなく

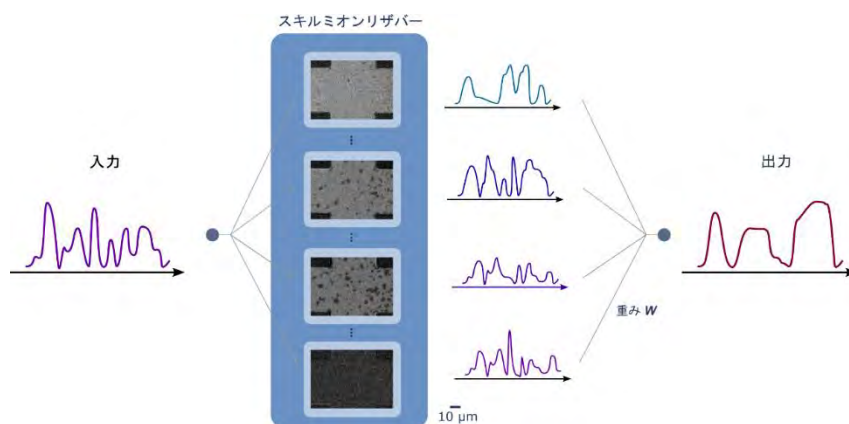


図 2 スキームオン物理リザーバー素子の概念図 十字状に加工したスキームオン薄膜を並べて作製した、スキームオン物理リザーバー素子を模式的に示したもの。十字状の素子はカー顕微鏡を用いて撮影した実際の磁気構造である。入力信号は、それぞれの十字状の素子で変換される。その変換された信号をある重みで重み付けした後、足し合わせたものが、最終的な出力となる

過去の入力信号にも依存していることが明らかになった。このことから、磁場誘起のスキームオンダイナミクスは物理リザーバー素子に要求される性質を持っており、スキームオンが物理リザーバー素子に応用可能であることが分かった。

次に、スキームオン物理リザーバー素子を用いて、人工知能素子の性能評価手法の一つである、波形認識問題が実行可能であることを確認した(図 3)。波形認識問題とは、入力の波形に対応した値を出力する問題である。今回の場合、サイン波と矩形波のランダムな組み合わせを入力し、入力がサイン波なら 1、矩形波なら -1 を出力する(図 3a)。図 3b に示したように、入力信号はスキームオン物理リザーバーにより変換される。物理リザーバーからの出力を適切な係数で線形変換した最終的な出力は適切な値を出力しており、スキームオン物理リザーバーが波形認識問題を実行可能であることが明らかになった(図 3c)。さらに、Pt/Co/Ir 積層薄

膜の Co の厚さを变化させ物質定数を制御することで、形成するスキームオンの数が異なる複数の物理リザーバー素子を作製した。そして、スキームオン数に対する波形認識問題の認識率の依存性を調べた。その結果、スキームオンの数が増えるにつれ波形認識の認識率が高くなる傾向があることを発見した。このことは、スキームオンを用いることで物理リザーバー素子の高性能化につながる可能性を示している。

最後に、同様のスキームオン物理リザーバー素子を用いて、波形識別よりもより複雑かつ実用的な識別問題である、手書き数字識別問題を実行できることを確認した。まず、0 から 9 までのさまざまな人が書いた手書き数字(図 4a)を、スキームオン物理リザーバー素子に入力できるように前処理を施した。データセットには、手書き数字識別問題で広く使われている Mixed National Institute of Standards and Technology database (MNIST)を用いた[5]。そして、合計

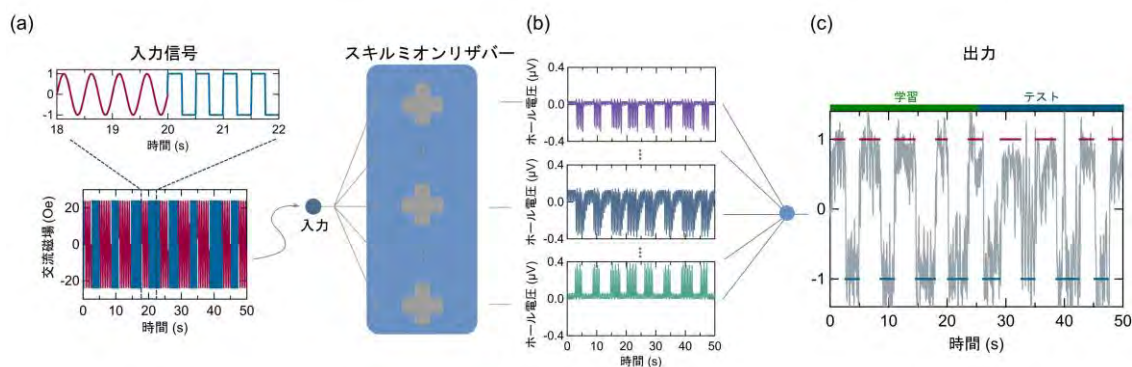


図 3 スキームオン物理リザーバー素子による波形認識 (a)入力信号の波形。入力信号は、サイン波(赤)と矩形波(青)のランダムな組み合わせとする。(b)入力信号をスキームオン物理リザーバー素子により変換した波形。(c)最終的な出力(灰色)と正しい値(赤と青)。スキームオン物理リザーバーで変換した信号をある重みで足し合わせたものが最終的な出力となる。入力信号がサイン波なら出力が 1、矩形波なら -1 となるように、重みを最適化(学習)する。データを前半と後半に分け、最適化には前半のデータを用いた。学習に用いていない後半のデータ(テスト)に対しても、正しい出力が得られることが分かる。

まとめと展望

謝辭

1. G. Tanaka, et al. *Neural Networks* **115**, 100 (2019).
2. D. Prychynenko, et al. *Phys. Rev. Appl.* **9**, 014034 (2018).
3. N. Nagaosa, & Y. Tokura, *Nature Nanotech.* **8**, 899 (2013).
4. T. Yokouchi et al., *Science Advances* **8**, eabq5652 (2022).
5. Y. LeCun, et al., *Proceedings of the IEEE*, **86**, 2278 (1998).
6. T. Yokouchi et al., *Nature Nanotech.* **15**, 361 (2022).

FFLO 超伝導が創る空間的異方性

物性研究所附属国際超強磁場科学研究施設 今城 周作

超伝導は1911年にOnnesにより発見された量子現象であり、電気抵抗ゼロやマイスナー効果等の性質を示す。超伝導の発現機構を説明するために発見後の約半世紀間で様々な研究が行われ、1957年にBardeen, Cooper, Schriefferによって提案された微視的理論(BCS理論)により大枠が解明された。BCS理論では、電子-格子相互作用を介して電子間に引力が生じて電子対(クーパー対)が形成され、電子対の凝集状態となって超伝導状態が現れる。この際、クーパー対となる2つの電子はそれぞれアップスピンとダウンスピンをもち、お互いに正反対の運動量 $\mathbf{k}$ と $-\mathbf{k}$ を有すると仮定されている。このBCS理論は単体金属で現れるような超伝導状態の振舞いをよく説明するが、高温超伝導体等ではBCS理論の枠から逸脱するため、非従来型超伝導と呼ばれている。

エキゾチックな非従来型超伝導の一つとして、1964年にFuldeとFerrell [1]、LarkinとOvchinnikov [2]が同年に別々で理論的に提案したFulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO)状態が知られている。図1(a)に示すように、BCS理論における $\mathbf{k}$ と $-\mathbf{k}$ の電子による対ではなく、FFLO状態では $\mathbf{k}$ と $-\mathbf{k}+\mathbf{q}$ の電子による対形成が考えられており、クーパー対が有限の重心運動量 $\mathbf{q}$ をもつ。ただ、BCS的なクーパー対に比べ、 $\mathbf{q}$ の存在により相手の電子がフェルミ面上から外れて対となることができず凝縮エネルギーで損をし、 $\mathbf{q}$ の分だけ運動エネルギーが高くなることを考えると、不利な対形成であることが予想できる。しかし、強磁場中では状況は変わり、ゼーマン効果によってアップスピンとダウンスピンで分裂したフェルミ面ではBCS的対形成は不安定化され、逆に $\mathbf{q}$ によってはFFLO状態が安定となる場合がある。

FFLO状態が現れると $\mathbf{q}$ の存在により秩序変数が変化する。超伝導を特徴付ける超伝導ギャップ関数 Δ に更に $\cos(\mathbf{q}\mathbf{r})$ という項が追加される訳であるが、これは図1(b)のようにギャップが $\mathbf{q}$ の方向に沿って実空間上で周期的に変調した構造を示すことを意味している。この空間変調性がFFLO状態の最大の特徴の一つであり、この空間変調性は $\mathbf{q}$ の方向に依存した空間的な異方性を示す。逆に言えば、空間的異方性を検出することでFFLO状態の存在を

実証できるはずである。

ここまで理論的な背景を紹介したが、現実ではFFLO状態がどのような条件で現れるか考えよう。まず、低磁場で安定なBCS状態がゼーマン効果によって完全に抑制されるには、パウリ極限と呼ばれるスピン分極エネルギーが凝縮エネルギーを上回る強磁場以上である必要がある。パウリ極限以上ではBCS状態は破壊され、一方、FFLO状態は空間的に変調することでスピン分極のエネルギーでの利得分だけ生き残ることができる。しかし、ここで注意したいのは、超伝導はスピンによるゼーマン効果だけでなく、電荷によるローレンツ力の影響も受ける。これは軌道破壊効果と呼ばれ、通常の超伝導体ではフェルミ速度が大きいために、ゼーマン効果より強く軌道破壊効果が働き、パウリ極限よりもはるか低磁場で超伝導自体が抑制されてしまうためFFLO状態が現れる余地はない。極端に電子の有効質量が大きくなければ軌道破壊効果は回避できないため、重い電子系超伝導か低次元超伝導の伝導方向に平行に磁場をかけるような特異な場合でなければFFLO状態は実現しない。更に、電子の平均自由行程が実空間変調の周期より十分長くなければ、散乱によって変調構造が抑制されてしまうため、FFLO状態の実現には極めてクリーンな電子系が必要となる。

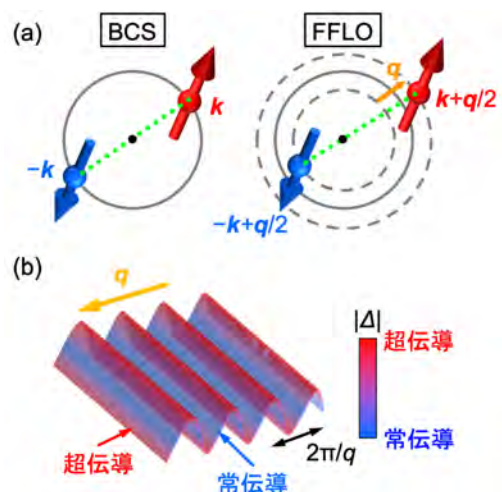


図1 (a) BCS状態とFFLO状態におけるフェルミ面上での電子対形成の概略図。(b) FFLO状態における超伝導秩序変数 Δ の実空間変調構造。超伝導部分(赤)と常伝導部分(青)が $\mathbf{q}$ に沿って実空間で周期的に現れる。

本研究 [3]では、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ という有機超伝導体を研究対象とした。この物質は物性研の現所長である森初果氏が世界初の 10 ケルビン級有機超伝導体として 30 年以上前に発見した物質である [4]。この物質に対し、パルス強磁場中で磁場方向を 0.1°以内の精度で制御しながら二方向同時の縦波超音波測定を行なった。有機物の超音波測定の例は非常に少ないが、超伝導転移に非常に敏感であることが知られている。この測定によって得られた 1.6 ケルビンにおける音速の磁場変化が図 2 である。磁場は伝導面内 *c* 軸に平行に印加されており、音波の変位 *u* はそれぞれ *b* 軸(青)、*c* 軸(赤)に平行である。電気抵抗測定からは 25 テスラ以下が超伝導状態であることが確認されている。低磁場領域では両者のデータに大きな差は見られないが、21-25 テスラの磁場領域では異なる振舞いを示す。つまり、この異方性を示す超伝導領域は FFLO 状態による空間変調が現れている。実際、先行研究から κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ のパウリ極限は約 21 テスラと予想されており、今回の結果と矛盾しない。このように直接的に FFLO 状態の空間的異方性を検出した例は本研究が初めてであり、これにより *q* の方向を決定することが可能となる。今回の *u*||*b* のデータでは、音速が増大する特徴的なピーク構造を示す。空間変調による超周期構造がその方向の弾性定数を増大させること考えると、今回の異方性はこの FFLO 状態の *q* は *b* に平行な方向に向いていると考えるのが自然である。

温度 1.6 ケルビン
 $H \parallel c$

$u \parallel c$

$u \parallel b$

FFLO 領域

音波

音速 (任意単位)

磁場 (テスラ)

ただ、他にも有効なネスティングベクトルがあるため、 $\mathbf{q}$ が複数存在して複雑な異方性が現れ、その異方性の一面を見ている可能性は否定できない。実際に低磁場の超伝導状態の対称性は複数の対称性成分が重なって複雑であるという提案がある。もし複数の変調が重なった $\text{multi-}\mathbf{q}$ 状態の場合、トポロジカル的に非自明な変調構造を創発する可能性もあり、今後は更に深い理解が求められる。今回は実験の都合上、磁場方向を c 軸に向けた実験しか実施できなかったが、今後他方向面内磁場中の実験によってこのような議論が可能となると考えられ、FFLO 状態の理解が更に進んでくると期待される。

謝辭

本研究は、東京大学物性研究所の野村肇宏氏、小濱芳允氏、金道浩一氏との共同研究で行われました。また、JSPS 科研費 (JP20K14406, JP22H04466, JP20K14403, JP22 H00104) の支援のもと遂行されました。

参考文献

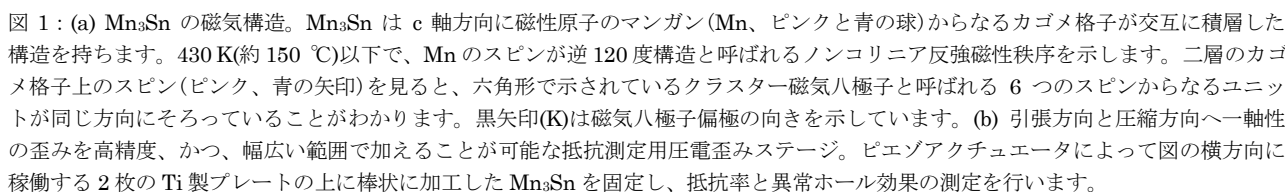
- [1] P. Fulde, & R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **35**, A550 (1964).
- [2] A. I. Larkin, & Y. M. Ovchinnikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 1136 (1964).
- [3] S. Imajo et al, *Nat. Commun.* **13**, 5590 (2022).
- [4] H. Urayama et al., *Chem. Lett.* **17**, 55 (1988).
- [5] D. Guterding et al., *Phys. Rev. B* **94**, 024515 (2016).

ノンコリ よる異常

中辻 知

現在、コンピュータやスマートフォンにおける情報処理には電力供給をしないと情報が失われてしまう揮発性の半導体メモリが用いられています。近年のインターネットの普及による社会の高度情報化は著しく、爆発的に増加する情報を低消費電力で処理するために電源オフ状態でも情報が失われない不揮発性メモリの開発が行われています。強磁性体を用いた磁気抵抗メモリ(MRAM)は、低消費電力性と共に高書き換え耐性を満たし得る不揮発性メモリとして研究が進められ、近年実用化が進んでいます。MRAMの更なる高速化や高密度化を実現する研究開発指針の1つとして、強磁性体を反強磁性体で代替することが検討されています。なぜなら、反強磁性体では情報の記憶速度がピコ秒(従来の強磁性体の100~1000倍)になることが期待される、また、スピンの互いの磁化を打ち消し合う配置になり正味の磁化を持たないため、従来より100倍速い演算が可能、かつ、高密度なMRAMが原理上実現可能であるためです。一方で、反強磁性体を用いるためには「0」と

我々の研究グループでは Mn と Sn からなる反強磁性体 Mn_3Sn の研究を行っており、反強磁性体では検出が困難だと信じられてきた異常ホール効果や異常ネルンスト効果、磁気光学カー効果などの読み出し信号を室温で検出できることを明らかにしてきました[1-3]。これらの信号が得られる理由は、 Mn_3Sn のノンコリニア反強磁性秩序が強磁性秩序の場合と同様に巨視的に時間反転対称性を破っているためです。強磁性体の場合の磁気秩序変数は磁化ですが、 Mn_3Sn の場合にはクラスター磁気八極子 [4](図 1a) がその役割を担っており、磁気八極子を制御することで上記の読み出し信号のコントロールが可能です。これまで、クラスター磁気八極子を制御する手法として磁場[1]や電流[5,6]が用いられてきましたが、本研究では至みに着目しました[7]。純良な Mn_3Sn 単結晶試料を用いて、ピストン



シリンダー型の一軸圧力セルでの磁化の圧力応答を測定した結果、一軸圧力に対し自発磁化 M_S が線形に増大するピエゾ磁気効果を観測しました。また、 Mn_3Sn がこれまで報告されてきた中で最大級のピエゾ磁気係数 $\sim 0.03 \text{ m}\mu_B \text{ f.u.}^{-1} \text{ MPa}^{-1}$ を室温で示すことが分かりました。さらに、電気輸送特性の測定を行いながら試料の引張方向と圧縮方向の両方に一軸性の歪みを高精度、かつ、幅広い範囲で加えることが可能な抵抗測定用圧電歪み測定ステージ(図 1b)を開発し、歪みによる異常ホール信号の変化を室温において測定しました(図 2a)。通常、異常ホール効果などの電気輸送特性に観測可能なほどの変化をもたらすには、1%程度の歪みが必要でした。しかし、本研究では 0.1% 程度の非常に小さな歪みで異常ホール効果のつくるホール信号を変化させることに成功しました(図 2b)。ホール信号は単に大きさが変化しただけでなく、その符号まで反転

する振る舞いが観測され、ノンコリニア反強磁性体 Mn_3Sn では歪みにより信号が非常に高効率に制御できることが分かりました。これまでの強磁性体での研究では磁化の方向に対応してホール信号が変化していました。その一方で、 Mn_3Sn ではピエゾ磁気効果により生じる微小な磁化 M_S とホール信号(クラスター磁気八極子偏極 K)が歪みによって別々に制御できることを実験と理論の双方の研究から明らかにしました(図 3)。

【まとめと今後の展開】

反強磁性体を用いた電子デバイスの開発には薄膜が必要です。現在、各国の研究グループが Mn_3Sn および関連物質の薄膜の開発に取り組んでおり、その膜界面物性に着目した反強磁性スピントロニクス分野[8]での研究が活発化しています。薄膜では、基板との格子不整合や圧電材料を用いることで、歪み効果が異常ホール効果をはじめとする読み出し信号を制御することが可能です。実際、 Mn_3Sn 薄膜を用いた電流でホール信号を反転することが可能なデバイス(スピン軌道トルク磁気反転デバイス)において、歪みによる垂直磁気異方性を導入することで、ホール信号が高効率に電氣的に制御できることが明らかになるなど、歪みによる新たな信号の制御の技術の開発につながっています[6]。本研究で開発された歪みによる反強磁性体の磁気状態の高度な制御技術は、上記のホール信号の電氣的制御をより高速、低消費電力で実現するための重要な指針となります。今後、MRAM をはじめ、さまざまな磁気デバイスの高機能化に関する研究に本技術が展開されることが期待されます。

また、本研究で読み出し信号として用いた異常ホール効果はノンコリニア反強磁性体 Mn_3Sn が持つトポロジカル電子状態であるワイル半金属状態に由来しています[9]。物質のトポロジーに由来する性質は、近年の固体物理学において大きな注目を集めており、ワイル半金属状態の電氣的な制御は学術的に大変興味を持たれています。今回開発した一軸性の歪みによる符号の反転を含めた異常ホール効果の制御手法は、これまで観測できなかったワイル半金属状態における新しい現象の開拓へつながることが期待されます。

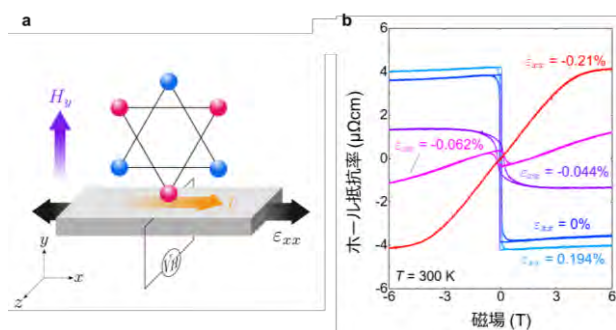


図 2 : (a) 歪み下での異常ホール効果の測定構成の概要図。ここでは x 方向への引っ張り歪み下で、試料の z 軸方向に発生するホール電圧 V_H を測定している。 H_y は外部磁場、 I は電流、 ϵ_{xx} は x 方向への歪みを示している。(b) さまざまな歪み ϵ_{xx} 下での Mn_3Sn のホール抵抗率の磁場依存性。

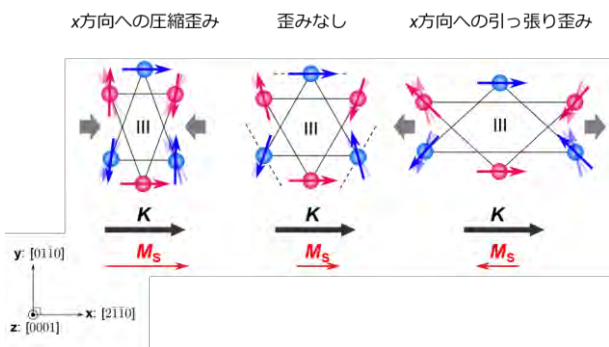


図 3 : Mn_3Sn では一軸性歪みの符号によって、ピエゾ磁気効果によって生じる微小磁化 M_S と Mn_3Sn の異常ホール効果の起源であるクラスター磁気八極子偏極 K の向きを独立に制御できる。

【謝辞】

本研究は東大物性研/ブリティッシュコロンビア大の S. Dasgupta 氏、中央大の橘高 俊一郎氏、バーミンガム大の C. W. Hicks 氏、コーネル大の B. J. Ramshaw 氏、F. Theuss 氏、ジョンスホプキンス大学の O. Tchernyshyov 氏との共同研究により行われました。ここに感謝を申し上げます。

【引用文献】

- [1] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, and T. Higo, *Nature* **527**, 212 (2015).
- [2] M. Ikhlas, T. Tomita et al., *Nature Phys.* **13**, 1085 (2017).
- [3] T. Higo et al., *Nature Photon.* **12**, 73 (2018).
- [4] M.-T. Suzuki et al., *Phys. Rev. B* **95**, 094406 (2017).
- [5] H. Tsai, T. Higo et al., *Nature* **580**, 608 (2020).
- [6] T. Higo, K. Kondou et al., *Nature* **607**, 474 (2022).
- [7] M. Ikhlas, S. Dasgupta, F. Theuss, T. Higo, S. Kittaka, B. J. Ramshaw, O. Tchernyshyov, C. W. Hicks and S. Nakatsuji, *Nature Phys.* **18**, 1086 (2022).
- [8] T. Jungwirth et al., *11*, 231 (2016).
- [9] K. Kuroda, T. Tomita et al., *Nature Mater.* **16**, 1090 (2017).

「テラヘルツ科学の最先端 VIII」最優秀若手研究者賞を受賞して

極限コヒーレント光科学研究センター 松永研究室 特任研究員 室谷 悠太

2021 年 11 月 24・25 日に行われたシンポジウム「テラヘルツ科学の最先端 VIII」において、最優秀若手研究者賞を受賞する栄誉に与りました[1]。この賞は、学術の向上に貢献する優秀な発表を行った若手研究者 1 名に授与されるものです。授賞式は 2021 年 11 月 25 日にオンラインで行われました。発表に対して賞を頂くのは今回が初めてで、大変嬉しく思っております。物性研だよりへの寄稿も早くから打診を受けていましたが、関連論文が出版されたら……と考えているうちに、一年が経過してしまいました。先日ようやく論文が出版され [2]、ついに本稿に手を付ける運びとなったわけです。研究者の皆様は百も承知だと思いますが、査読とはままたまらないものですね。

受賞対象となった発表のタイトルは「テラヘルツ駆動されたディラック半金属 Cd_3As_2 における誘導レイリー散乱と室温無散逸スローライト生成」です。根底にあるのはフロッケ・エンジニアリングと呼ばれる現象への興味です。エネルギーバンドを持つ固体にレーザー光を当てると、電子が光子の衣をまとい「フロッケ状態」と呼ばれる状態を作り、新たな物性を発現することが予想されています。フロッケ状態が形成されること自体はトポロジカル絶縁体を対象に角度分解光電子分光によって確かめられていますが、電気伝導や光吸収といった基本的物性にフロッケ状態がどのような影響を与えるかはこれまで明らかになっていませんでした。

そこで、松永研では三次元ディラック半金属 Cd_3As_2 に注目してフロッケ状態の研究を進めてきました。ディラック半金属は、普通の金属と違って、自由電子が質量 0 の粒子として振る舞う物質群です。このことから、電子が散乱を受けにくい、長波長の光でもバンド間遷移が可能といった特徴が現れ、フロッケ・エンジニアリングを実践するのに適した舞台となっています。光吸収による加熱を抑えてフロッケ状態を作るために、励起光には光子エネルギーの低いマルチテラヘルツ波を用いました。周波数にして 10-60 THz 程度のマルチテラヘルツ帯は従来の技術では精密な分光が難しく、比較的最近になって技術開発が進んできた帯域です。高強度マルチテラヘルツ光源の開発には松永隆佑 准教授だけでなく、物性研の吉信淳 教授、小林洋

平 教授らのご協力をいただきました。また、プローブ光には周波数 12-45 THz を一度にカバーする広帯域マルチテラヘルツパルスを用いました。このパルスを用いた超高速分光技術は神田夏輝 助教らによって開発されたものです[3]。以上の実験系を用いて Cd_3As_2 薄膜に励起光を照射している間の吸収スペクトルを測ったところ、励起光の周波数 (30 THz) を挟んで低周波側に吸収ピーク、高周波側に光学利得のピークが現れることが分かりました。これは従来の理論では全く予想されていなかった応答です。

物性研の池田達彦 助教との共同研究により、この現象はポンプ光と共鳴する遷移周波数を持ったフロッケ状態間の遷移に起因するものであることを示しました。この過程が見落とされていたのは、光電場との二次の相互作用を媒介する「反磁性結合」が軽視されていたことによります。平衡状態では反磁性結合は光吸収に寄与しないのですが、励起光が当たっている間は無視できなくなるのです。以上の微視的理解から巨視的な有効模型を作ることによって、この現象がプラズマ振動にアシストされた誘導レイリー散乱とみなせることも示しました。誘導レイリー散乱は、光励起された領域の屈折率が変化することで励起光がプローブ光と同じ向きに回折され、吸収や光学利得を引き起こす現象です。個々の電子は反磁性結合を介して少しずつ屈折率を変えますが、固体中には電子がたくさんあるため、それらが積み重なって巨大な屈折率変化に至ります。その現れの一つがプラズマ振動の顕著なブルーシフトであり、もう一つが巨大な誘導レイリー散乱であったわけです。

誘導レイリー散乱に付随する現象として、本研究では 100 GHz 近い帯域幅にわたって光の群速度が 300 分の 1 程度に小さくなる様子も観測しました。このようにして光の群遅延を操作することはスローライト生成と呼ばれ、光情報処理の一翼を担うものとして期待が持たれています。金属的な物質は誘導レイリー散乱のようなコヒーレントな現象には向かないと考えられがちですが、決してそんなことはなく、むしろ短パルスのスローライト生成には有利であることが分かりました。以上のように、フロッケ・エンジニアリングの考え方によって物質の新しい機能性を引き出すことができたと考えています。

参考文献

-
- A young man with short black hair and glasses, wearing a plaid shirt, is smiling and holding a framed certificate of appreciation. The certificate is from the University of Tsukuba and is addressed to him for his contribution to the research project. The certificate is written in Japanese and includes the university's name, the project title, and the names of the researchers.

MagnEFi conference 2022 の Prize of Best Scientific Poster を受賞して

物性理論研究部門 加藤研究室 博士課程 1 年 石川 卓門

この度、ギリシャにて開催された MagnEFi Conference 2022 にて Prize of Best Scientific Poster を受賞させていただきました。この賞はポスター発表を行った 48 名の中から最も優れた発表を行った 1 名に送られる賞です。このような賞をいただくことができ、大変光栄です。

受賞対象となったポスター発表のタイトルは「Spin-Hall magnetoresistance in quasi-two-dimensional antiferromagnetic insulator / metal bilayer systems」です。スピントロニクス分野では、スピン自由度を用いたデバイス応用が期待され、実験・理論共にさかんに研究が行われています。なかでもスピンホール磁気抵抗効果(SMR)はスピン角運動量の流れであるスピン流を介することで生じる磁気抵抗効果であり、磁気メモリへの応用や磁性体を持つ磁気励起の検出手法として期待されています。

SMRは、スピン軌道相互作用によって電流からスピン流への変換を起こすスピンホール効果とスピン流から電流への変換を起こす逆スピンホール効果が合わさって生じる新しい磁気抵抗効果であり、2013年に強磁性絶縁体と常磁性金属を接合させた系で初めて発見され[1]、これまで様々な物質を用いたSMRが実験によって観測されています。近年では、強磁性絶縁体の代わりに反強磁性絶縁体を用いたSMRも活発に研究されています。反強磁性絶縁体を用いた磁気デバイスはメモリの高密度化に貢献すると考えられており、SMRは反強磁性絶縁体のネールベクトルの有力な検出手法と考えられています。これまでに多くの実験が行われており、SMRの温度依存性や反強磁性絶縁体の膜厚依存性などが調べられています[2]。

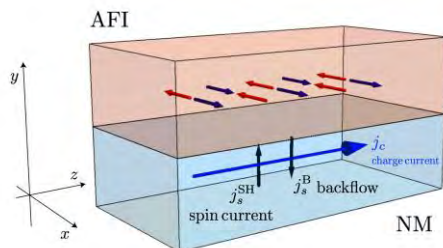


図 1 反強磁性絶縁体と常磁性金属の接合系を用いたスピンホール磁気抵抗効果のセットアップ。論文[4]より引用。

SMR の理論解析はスピン拡散方程式を用いた現象論的な議論が主流ですが、スピンミキシングコンダクタンスと呼ばれる現象論的パラメータを用いるため、温度依存性などを議論することが困難でした。2020 年に非平衡グリーン関数法に基づいて SMR の微視的理論[3]が構築されましたが、この研究では低温領域に対してスピン波近似を用いた解析のみが行われ、スピン波近似が適用出来ない高温領域を含む広い温度領域での温度依存性の解析は課題として残っていました。

本研究では、反強磁性絶縁体を用いた SMR のセットアップを考え(図 1)、非平衡グリーン関数を用いた微視的理論[3]を基に SMR を定式化した上で、微視的理論で必要となる局所スピン帯磁率を量子モンテカルロ法によって数値的に評価し、反強磁性絶縁体の SMR の温度依存性について、スピンの大きさ、膜厚、乱れなどの依存性を議論しました。

その結果、SMR のピーク温度と反強磁性絶縁体の転移温度の関係や SMR の膜厚依存性など実験結果と半定量的に一致する結果が得られました。また、スピンの大きさに依存して SMR の値や高温でのふるまいが変わることや、乱れの効果によって SMR のシグナルが抑えられるなどの性質を明らかにしました。これらの結果は、SMR の新たな理解につながることを期待されます。

謝辞

本研究は、加藤岳生准教授(物性研究所)、松尾衛氏(中国科学院大学カブリ理論科学研究所)との共同研究により行われました。また、本研究は東京大学知能社会国際卓越大学院プログラム、JSPS 科研費(課題番号: 20K03831、20H01863)の助成を受けたものです。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] H. Nakayama, M. Althammer, Y. T. Chen, K. Uchida, Y. Kajiwara, D. Kikuchi, T. Ohtani, S. Geprags, M. Opel, S. Taka- hashi, R. Gross, G. E. W. Bauer, S. T. B. Goenenwein, and E. Saitoh, Phys. Rev. Lett. **110**, 206601 (2013).
- [2] D. Hou, Z. Qiu, J. Barker, K. Sato, K. Yamamoto, S. Velez, J. M. GomezPerez, L. E. Hueso, F. Casanova, and E. Saitoh, Phys. Rev. Lett. **118**, 147202 (2017).
- [3] T. Kato, Y. Ohnuma, and M. Matsuo, Phys. Rev. B **102**, 094437 (2020).
- [4] T. Ishikawa, M. Matsuo, and T. Kato, arXiv:2208.08096 (2022).



外国人客員所員を経験して

Oliver Portugall
CNRS-LNCMI, Toulouse, France
oliver.portugall@lncmi.cnrs.fr

International collaboration is an important part of contemporary research that serves many purposes in parallel. At any time in history, the free circulation of knowledge among scientists has triggered creative processes and, on a more societal level, helped to overcome cultural differences. A more recent and more practical motivation is the emergence of research infrastructures for measurements under extreme conditions. As the implementation and operation of such infrastructures requires substantial investments, both their use and the necessary development effort should be shared to some extent. Megagauss magnetic fields and the current project are a good example. While the ISSP-IMGSL is the uncontested world-leader in this area, Megagauss fields are also part of the techniques proposed to European users by my home institution, the French National High Magnetic Field Laboratory (Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, LNCMI). I have therefore been extremely elated by the suggestion to intensify our longstanding informal relationship and to share part of our development efforts and experience.

On a more personal note, the prospect to work at the ISSP has also triggered nostalgic feelings as I started my scientific career 30 years ago as a JSPS postdoctoral fellow in this institute. In Roppongi, where the ISSP was located at that time, I established many professional and private relationships that persist to this day, developed a profound affection for the Japanese culture and, most importantly, I learned how to work with single-turn coils. Immediately after returning to Germany I had the chance to put this experience into practice and set up the first European Megagauss installation in Berlin, an achievement, that finally brought me to Toulouse where I managed the pulsed field installations and technical staff of the LNCMI for the next 20 years. Retiring from this position in 2020 allowed me to boost the part-time Megagauss activity I had established in Toulouse, making it once more a full-time occupation. With the approval of the LNCMI and CNRS hierarchies, the new orientation of my activities also gave me the freedom to close the cycle and apply for a visiting professor position in the place where it all began ...

Sentimental feelings notwithstanding, the principal motivation for my application was of course to collaborate on scientific-technical issues regarding single-turn coils. At present, only Kashiwa and Toulouse have the capacity to perform scientific experiments above 100 T on a regular basis using this type of equipment. Both laboratories also promote the use of their facilities by the international scientific community and therefore share two basic interests: firstly, to perform and advertise landmark experiments that prove the usefulness of Megagauss fields and thus help to attract new users; and secondly, to optimize existing, and implement new, measurement techniques that reliably produce high quality data. Both problems have been



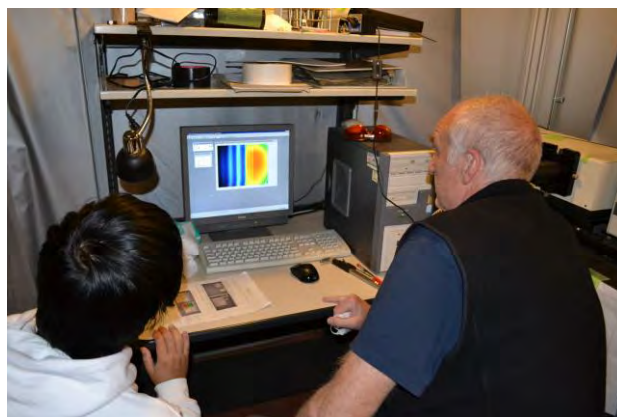
addressed during my stay.

As a potential landmark experiment, we have started to perform interband absorption measurements on organic semiconductors, whose precise electronic structure remains elusive despite a growing technological importance. The reason for this lack of understanding lies in the very nature of molecular crystals in which the electronic properties of molecules can generally be predicted and controlled much better than the subtle but important influence of crystalline interactions. Phenomenologically, organic semiconductors are characterized by heavy charge carrier masses and low mobilities which makes them a perfect target for measurements in the highest available magnetic fields. Our measurements on rubrene single crystals are currently evaluated and may give rise to further experiments using even higher fields obtained by electromagnetic flux compression.

In parallel with this scientific project, we have performed extensive tests to investigate ways to deal with electromagnetic perturbations that constitute the principal handicap for sensitive electrical measurements in Megagauss fields. Both Megagauss-compatible shieldings and the post-treatment of reproducible perturbations have been considered in this respect, and our plan is to pursue these investigations in both Kashiwa and Toulouse to pave the way for new experimental techniques such as electric transport measurements.

As the latter project concerns practically any measurement involving Megagauss fields it has naturally been the subject of many discussions during my stay. In this respect, I want to thank all students and staff of the IMGSL for the open atmosphere and their willingness to share their results and practical experiences. I particularly enjoyed working with Dr Xuguang ZHOU whose help was essential in all experiments and who made himself available whenever I needed him. His curiosity and the discussions issuing from his questions have triggered many interesting new thoughts. My principal thanks go of course to Prof Yasuhiro MATSUDA for his implication in all stages and aspects of my visit, his warm welcome and my perfect

integration in his group. I am very much looking forward to pursue and extend our collaboration, both on a bilateral level between our laboratories and by linking the Japanese and European high-field communities via EMFL, the European Magnetic Field Laboratory.



My thanks also go to the ISSP administrative staff and in particular Mrs Yuko ISHIGUCHI for the smooth organization of my visit as well as some help in more private matters such as broken bicycles and new bank accounts. While the COVID-19 pandemic and repeated re-scheduling of my visit made everybody's life more complicated, I always felt well instructed regarding the latest developments and I particularly appreciated the precise instructions to facilitate my immigration procedure right after the re-opening of the Japanese borders.

Last but not least, my thanks go to the ISSP governance and the University of Tokyo for implementing this exemplary visiting professor program and for making international collaboration a key issue of their policy.

While I am writing these lines, my next visit to Kashiwa has already been scheduled and although I am not yet gone and our collaboration regarding Megagauss magnetic fields will continue in the meantime, I am already looking forward to another opportunity for intense discussions, exciting experiments and lots of fun.



令和 4 年

一般公開委員会委員長 川島 直輝

本年度の一般公開は、「探し出せ！「もの」の中のすごいもの」のキャッチコピーのもと、2022 年 10 月 22 日（土）に行われた。コロナ対策のため、昨年、一昨年に引き続き、オンラインでの開催となった。昨年度までは、各コンテンツの視聴・参加の入り口として、広報室の作成した一般公開用ウェブサイトからのアクセスに加えて独自開発したプラットフォームであるバーチャル物性研を利用したが、今年度は後者に替えて商用アプリケーションである Gather Town をプラットフォームとして採用した。図 1 のようなややレトロなビデオゲーム風のバーチャルワールドの中を自分の身代わりになるアバターが動き回り、いく先々のマーカーをクリックするとそれに対応するコンテンツの視聴ができるほか、参加者同士の音声での会話、文字によるチャットなどもできるようになっている。会場のレイアウトや装飾などは物性研スタッフが作り込みを行った。

図 2 に 2022 年物性研一般公開で公開されたコンテンツの一覧を掲載する。今年度の出展は 22 であった。うち、一般公開委員会で用意したライブコンテンツは 6。とくに今回のサイエンスカフェでは、放射光を用いた観測について、木村所員が多くの興味深い実例を挙げながら、一般参加者にも興味をもってもらえるように丁寧平易に説明をしてくださった。(図 3) また、プチサイエンスカフェでは、物質設計評価施設の浜根技術専門職員の「デンケンで覗くちいさな世界」、松田(康) 研石井助教による「地上で一番強い磁場」、尾崎研河村助教による「電子の海面を滑る」など、さまざまな話題について、これも一般の視聴者の興味をひくような話をしていただいた。とくに、河村助教の企画のテーマである「フェルミ面」という専門的なキーワードが意外と注目を集めていたようだ。(図 4)



図 1 : Gather Town

令和4年度一般公開企画一覧

No	担当研究室名	提案責任者（担当）	企画名	企画内容	配信形式
	Gather,town	堀田 敏雄 堀田 将大	Gather,town	バーチャル展示会場	gather,town
1	一般公開委員会	鈴木 伸之 木村 隆志	サイエンスカフェ	ここで見える！最先端のエクス線写真の話	ライブ配信（Zoom等）
2	一般公開委員会	浜根 大輔 《電子顕微鏡室》	ブチ・サイエンス・カフェ（1）	デンケンで覗くちいさな世界	ライブ配信（Zoom等）
3	一般公開委員会	河村 光晶 《応用研》	ブチ・サイエンス・カフェ（2）	電子の海面を渡る	ライブ配信（Zoom等）
4	一般公開委員会	石井 裕人 《松田（康）研》	ブチ・サイエンス・カフェ（3）	地上で一番強い磁場	ライブ配信（Zoom等）
5	一般公開委員会	辻川夕貴 《松田康研究室 D2》 福島優斗 《近藤研究室 M2》	学生サイエンス・カフェ物理編	研究生活ってどんなかんじ？どうして大学院に進学したの？いろんな疑問に現役大学院生がお答えします。	ライブ配信（Zoom等）
6	一般公開委員会	亀山理紗子 《吉宿研究室 D1》 阪口佳子 《吉宿研究室 M1》	学生サイエンス・カフェ化学編	研究生活ってどんなかんじ？どうして大学院に進学したの？いろんな疑問に現役大学院生がお答えします。	ライブ配信（Zoom等）
7	ナノスケール物性研究部門 《長谷川研》	長谷川 幸雄	びっくり！！真空の世界	普通の大気圧よりも低い状態である「真空」は、産業界だけでなく、飲み物の保通や食品の保存のような我々の身近なところでも利用されている。 そこで、その真空から生まれるさまざまな効果をも「感覚的に捉える真空実験」の動画を上映する。 余力があれば、真空中で観察した原子の姿も配信する。	常設（動画）
8	ナノスケール物性研究部門 《リップマー研》	リップマー ミック	Very thin materials	非常に薄いセラミック膜を成長させる方法を見てみよう	常設（ポスター）、常設（動画）
9	量子物質ナノ構造ラボ 《藤本研》	藤本 信吾	LSI（集積回路）から量子技術へ	量子物質ナノ構造ラボでは、大規模集積回路（LSI）に使う微細加工技術を使って、数nmな量子技術素子を作製し、量子現象の研究を行っています。その様子を以下の動画（25分程度）で紹介します。 1. 量子ナノラボの紹介 半導体素子開発の歴史（4m） 2. フォトリソグラフィ加工の実演（3m） 3. 電子線リソグラフィ加工の実演（3m） 4. 2重量子井戸素子の特性と発振（実験実演）（3m） 5. 量子ポイントコンタクト、量子ドットクーロン振動、量子ホール効果、飛行量子ビット（実験実演）（7m） 6. まとめ（と許されれば、FSIのお願い）（3m）	常設（動画）
10	理論系グループ 《岡研、杉野研、尾崎研、川島研、野口研、常次研、押川研、加藤研合同》	森田 悟史	物性シミュレーションの世界	物性理論系グループ（岡研、杉野研、尾崎研、川島研、野口研、常次研、押川研、加藤研など）が合同で、物性シミュレーションの世界を小学生などの子供向けに説明する。具体的には常設のweb上（あるいはgather上）でシミュレーションの動画を中心に展示し、それを小中高生にもわかるような解説を置く。また理論Gの日常（学生や先生の1週間の予定やQ&Aのようなものを想定）に関しても訪問者にわかりやすく説明する展示を設けたい。	常設（ポスター）、静止画像（ポスター）
11	物性理論研究部門 《加藤研》	加藤 岳生	光と色彩の科学～光と色を通して観る物性物理学～ ポスター版	柏の葉アカデミア講座「光と色彩の科学」の内容を要約してポスターで紹介（もししてライブ配信のほうがよい？）	常設（ポスター）
12	短脈コヒーレント光科学研 究センター 《近藤研究室》	近藤 猛	物質中の電子を見る！～近藤研・岡崎研究紹介～	これまで本研究室で行われてきた研究成果を紹介するポスターを作成し、gather,town上で掲示する。また、本研究室で開発、使用している装置についての説明もgather,town上で行う。	常設（ポスター）
13	短脈コヒーレント光科学研 究センター 《板谷研究室》	板谷 治郎	超高速光科学の研究紹介	物性研・板谷研で行われている超短パルスレーザーとアト秒科学に関する研究を動画で紹介し。	常設（動画）
14	短脈コヒーレント光科学研 究センター 《小林研究室》	姜 東彦	リモートでレーザー体験！	レーザー加工/レーザー発振/そのほかレーザーの不思議と面白さを知らせるための体験をリモートで行うことができる企画である。レーザーには様々な種類があり、その用途も異なる。本企画はいろんな種類のレーザーを用いて何ができるかを選んで体験することが目的である。	ライブ配信（Zoom等）
15	国際超磁場科学研究施設	石井 裕人	めぐろうパルスマグネット：強磁場	事前に強磁場施設での様々な実験風景や、実験の様子などを撮影する。実験しているスタッフや学生さん、場合によっては共同利用の方にもあらかじめ了解をとって出演してもらい、ライブ配信する。撮影した動画は編集し、当日、zoomなどで流すが、ライブで解説をつける。30分程度の動画にして、時間帯を決めて、3回行う。毎回異なる解説者にして、アレンジはまかせ。最後に質問コーナーをつけて全体で45分くらいにする。	ライブ配信（Zoom等）
16	機能物性研究グループ 《岡研究室》	岡 隆史	量子物質とブラックホールの深い関係	物質中の電子やスピンの物理と、量子力学、一般相対論、そしてブラックホールといった物理の基礎理論がどのように関係して応用されているのかを一般向けにできるだけわかりやすく紹介。	常設（動画）、常設（ポスター）
17	機能物性研究グループ 《井上研》	井上 圭一	光ではたらくタンパク質の不思議	本企画では、私たちヒトや動物の目の中で光受容体として働くロドプシンなどを中心に、自然界にある光ではたらくタンパク質について、ポスター形式で紹介し。綺麗な色をしたタンパク質の写真などと共に、タンパク質分子の複雑さや巧妙さを伝えることを目的とします。	常設（ポスター）
18	凝縮系物性研究部門 《森研研究室》	藤野 智子	水素や電気を流す有機物	最近注目の水素自動車の動力源になっている「水素燃料電池」は、水素と酸素の化学エネルギーを電気エネルギーに変換するクリーンなシステムです。この燃料電池の電解質となる水素を流す有機物質や、金属のように電気を流す有機物の研究について紹介します。 （注）昨年のYoutube経由でのVRの企画として紹介した、「（1）ブチサイエンスカフェ「水素を運ぶ有機物～小さな分子のパッケージ～」、（2）研究動画「プロトン電池や燃料電池作ってみた」、（3）研究動画「結晶育成部屋：究極の有機電解質」、（4）研究動画「結晶育成部屋：結晶の中の水素が流れる」、をそのまま使う予定で、引っ越していただければ幸いです。	常設（動画）
19	凝縮系物性研究部門 《長田研究室》	田録 俊光	薄さの限界に挑め！世界中が驚いた「グラフェン」を作った方法とは？	開閉法と微細加工技術を用いてグラファイト結晶からグラフェンを作製する過程及びグラファイトやグラフェンの興味深い物理現象について、動画で観てもらうことにします。具体的にはまず母材であるグラファイトのいくつかの面白い特性をデモンストレーションします。次に接着テープのみを用いて単原子薄膜であるグラフェンが実際に作製される様子を紹介し、ノーベル賞受賞対象の研究が生まれる過程を追体験します。得られたグラフェンを利用可能な形に加工する技術について解説し、最後にグラフェンを用いた最新の研究の舞台であるグラフェンを挖って重ねる技術を紹介し。	常設（動画）
20	物質設計評価施設 《岡本研》	岡本 佳比古	物質中の電子がもたらす多様な機能	固体物質中の電子のもつ特徴をうまく引き出すことにより、超伝導・発光・冷却・アクチュエータといった、多様な機能をもつ材料を創ることが出来ます。そのような、固体中の電子が人社会の役に立つ例として、廃熱発電や局所冷却ができる「熱電変換」を中心に、演説を交えながら、分かりやすく説明します。	常設（動画）
21	物質設計評価施設設計部、 大型計算機室	福田 将大	物性科学とスーパーコンピュータ	昨年同様、動画やポスターを通して、物性研究所にあるスーパーコンピュータの仕組みや物性研究との関わりを解説する。	常設（ポスター）、常設（動画）
22	中性子科学研究施設	中島 多朗	オペランド計測100倍分の1mを100倍中性子ビームで見える物質のミクロな構造と機能	中性子科学研究施設の研究紹介ミニトークです。 「中性子」ってなんだろう？何で研究しているの？そんな疑問に答えます。 実は中性子は色々な物質の構造とその機能を研究するのにとっても役に立つすごい粒子なのです！	常設（動画）

図2：2022年一般公開コンテンツ一覧



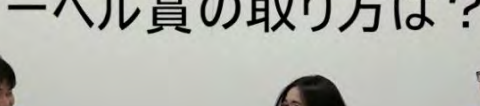
プチサイエンスカフェ(2)

電子の海面を滑る



河村 光晶 助教

ノーベル賞の取り方は？



質問募集中！

GatherのチャットもしくはYouTubeコメントで

ライブコンテンツ以外に、14 もの常設コンテンツが展示され、多くの視聴者の関心を集めていた。私自身もそのほとんどについて、中身を拝見し、非常に「面白く、ためになる」内容に強い印象をうけた。図7はそのなかでリップマー研から提供していただいた企画「非常に薄いセラミック膜を成長させる方法を見てみよう」のものである。



Age Group	Percentage of Respondents
18-24	85
25-34	80
35-44	75
45-54	70
55-64	65
65-74	60
75+	15

本企画が全所的な協力のもとに実現されたことは言うまでもないが、とくに素晴らしいコンテンツを多数提供くださったスタッフ・学生のみなさん、動きの遅い一般公開委員長を叱咤して物事が動くようにしてくださった広報室の餅田さん、万事粗漏なく手配りしてくださり困った時には必ず頼りになる事務系スタッフとくに総務係のみなさん、オンキャンパスジョブでお手伝いくださった大学院生のみなさん、Gather Town という慣れない試みをなんとか実現させてくださった情報技術室と大型計算機室の両福田と

ん、さまざまな企画とくにライブ配信が滞りなく実現するように環境を整えてくださった一般公開委員のみなさんには感謝申し上げたい。

理論タンパク質物性科学の最前線：理論と実験との密な協働

文責：筑波大学計算科学研究センター 教授 重田 育照

日 時：2022 年 7 月 26 日 10:00 ～ 2022 年 7 月 27 日 16:10

会 場：東京大学物性研究所本館6階 大講義室（ハイブリッド開催）

世話人：重田育照（筑波大学）、野口博司（物性研究所）、井上圭一（物性研究所）

URL : <https://noguchi.issp.u-tokyo.ac.jp/protein20/>

タンパク質は生命の基本要素であるが、各々のタンパク質はそれぞれ非常に異なる独特の物理的性質（物性）を有することが知られており、それらがタンパク質の機能につながっていると考えられます。したがって、タンパク質の物理的性質と機能の間の相関を研究することは、生命機能を理解する上で極めて本質的だと考えられます。

近年のスーパーコンピュータの発展、および解析手法の進展が相まって、生体内でおこる化学反応解析の分野は格段の進歩を遂げています。また、実験手法の精度の向上により適用限界も広がりを見せており、理論と実験との協働により、より深いレベルでの生命現象の理解が可能になると予想されます。

これまで物性研では固体系を中心に、表面、分子などの物性研究に対する共同利用・共同研究拠点として、また世界における物性研究の Center of Excellence として、分野を牽引してきました。今後は生体系や細胞レベルなど、既存の物性物理学・化学の枠を超えて、生物学や生命科学への貢献が期待されている状況です。

そこで、タンパク質物性科学における理論、計算と実験の共同研究について、最新の成果の情報交換をすると共に、今後の展望について議論するために、物性研の支援により本研究会をハイブリッド形式で開催させていただきました。

今回の研究会では、理論計算については、物性論でも馴染み深い分子動力学計算に基づくタンパク質ダイナミクス解析、ハイブリッド QM/MM 第一原理計算に基づく化学反応解析に加え、統計力学的積分方程式に基づく溶媒和理論、弾性体モデルに基づくオルガネラ形状の形成機構など、幅広い分野の講演をいただきました。また、実験については、X線・中性子・CryoEM等の構造解析技術、各種分光技術、1分子観察技術によるタンパク質構造・機能解析、および、タンパク質デザインや液液相分離現象など、生物物理で近年特に注目されているテーマについてご発表いただきました。また、16名のポスター発表においても、活発に議論がなされました。

本研究会を通して、生命科学における実験と理論の協働は今後もより発展していくであろうことが確認されたと確信しております。本研究会の注目度は非常に高く、参加登録数はオンライン参加も含め 102 名、現地参加は初日 26 名、二日目 29 名(計 32 名)、オンライン最大同時接続人数は 67 名でした。最後になりますが、本研究会にて講演を頂いた招待講演者の方々、現地及びオンラインでご聴講していただいたの方々、ポスター発表いただいたの方々、開催にご尽力いただいた世話人の先生・学生・スタッフの方々に心から感謝申し上げます。



プログラム

2022 年 7 月 26 日 (火)

10:00-10:10 Opening 野口博司

■ (座長 重田育照・筑波大学)

10:10-10:40 吉田紀生 (名古屋大学) 「生体分子の溶媒和統計力学理論によるタンパク質機能解析への展開」

10:40-11:10 五十嵐圭日子（東京大学）「固液界面におけるセルラーゼの動的挙動とシミュレーション化」

11:10-11:40 宮下治 (理化学研究所) 「構造生物学へのハイブリッドアプローチ：シミュレーションと実験データの融合」

11:40-12:10 中野祥吾（静岡県立大学）「遺伝的アルゴリズムと立体構造を用いた高機能化酵素デザイン」

■ (座長 新井宗仁・東京大学)

13:20-13:50 八木清 (理化学研究所) 「QM/MM 法の開発と生体分子の振動解析と化学反応への応用」

13:50-14:20 柴田幹大 (金沢大学) 「タンパク質の構造変化をリアルタイムかつナノスケールで可視化する」

14:20-14:50 立川正志 (横浜市立大学) 「オルガネラを形作る力学」

■ (座長 石北央・東京大学)

15:10-15:40 秋山良 (九州大学) 「排除体積効果による溶液の分離」

15:40-16:10 新井宗仁（東京大学） 「機能性タンパク質の理論的設計」

16:10-16:40 望月祐志 (立教大学) 「FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況、ならびに FMO-DPD 法の開発と応用」

■ (座長 永田崇・東京大学)

17:00-17:30 玉田太郎 (QST) 「電子伝達タンパク質の高分解能構造解析」

17:30-18:00 石北央 (東京大学) 「タンパク質中におけるプロトン移動と電子移動」

2022年7月27日(水)

■ (座長 野口博司・東京大学)

9:00-9:30 原田隆平 (筑波大学) 「生体機能を解明する分子シミュレーション手法の開発と応用」

9:30-10:00	庄司光男 (筑波大学)	「GLAS アルゴリズムによる酵素反応機構の理論解明：新規反応経路探索手法の開発と適用」
------------	-------------	--

10:00-10:30 吉澤拓也 (立命館大学) 「相分離性タンパク質 FUS の分子挙動解析」

■ (座長 原田隆平・筑波大学)

10:50-11:20 佐々木裕次 (東京大学) 「量子ビームを用いた1分子内部動態計測(DXT/DXB)の進展」

11:20-11:50 乙須拓洋 (埼玉大学) 「蛍光寿命の相関解析に基づく生体分子のダイナミクス解析」

13:00-14:30 ポスター発表 (対面のみ)

■ (座長 井上圭一・東京大学)

14:30-15:00 岩崎憲治 (筑波大学) 「病因となる天然変性タンパク質の構造・機能解析」

15:00-15:30 當舎武彦 (理研・SPring-8)「金属酵素活性中心における一酸化窒素還元反応の分子機構」

15:30-16:00 寺川剛 (京都大学) 「分子シミュレーションと実験で解き明かすエピゲノム修飾継承の分子機構」

16:00-16:10 Closing



◎ ポスター講演者一覧：

- | | |
|----------------|---|
| 甲田信一（分子科学研究所） | 「精密反応モデリングとベイズパラメータ推定で明らかにするシアノバクテリア時計タンパク質 KaiC の多量体構造の機能的役割」 |
| 奥村久士（分子科学研究所） | 「赤外自由電子レーザーによるアミロイド線維破壊の分子動力学シミュレーション」 |
| 堀優太（筑波大学） | 「酸化型[Ni-Fe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究」 |
| H. Kowit（筑波大学） | 「Evaluation of brominated baicalein as a promising SARs-CoV-2 Mpro Inhibitor」 |
| 井上圭一（東京大学） | 「タンパク質内プロトン移動が微生物ロドプシンの光機能を生み出すしくみ」 |
| 永田崇（東京大学） | 「レチナル光異性化酵素として機能する動物ロドプシンの光吸収・反応特性の解析」 |
| 野地隼平（新潟大学） | 「疎水表面の分極場のゆらぎに関する積分方程式理論」 |
| 藤浪大輔（静岡県立大学） | 「アミノ酸残基レベルの熱力学的解析が明らかにした自由エネルギー関係」 |
| 鹿倉啓史（京都大学） | 「アニオンチャネルロドプシン GtACR1 に対する QM/MM RWFE-SCF 法を用いた変異体モデリングおよび光励起エネルギー計算」 |
| 佐藤綾香（筑波大学） | 「高電位鉄硫黄タンパク質のクラスター周辺の構造が及ぼす影響と電子状態についての理論的解析」 |
| 菱田真史（筑波大学） | 「タンパク質の構造安定化に対する水と水の役割」 |
| 下山紘充（筑波大学） | 「高次機能複合体設計を目指した 3D-DS 現象の計算科学的再現」 |
| 富山翔平（東京大学） | 「分子シミュレーションにおける自由エネルギー計算手法の再重プロセスの二次補間による改良」 |
| 中西亮（東京大学） | 「クロマチンポリマーモデルにおけるクラスター寿命の相転移」 |
| 安東智大（京都大学） | 「QM/MM RWFE-SCF 法によるイクオリンのアロステリックな発光反応制御機構の理論解析」 |
| 荒井翔太（新潟大学） | 「混み合った環境における粘性の理論」 |

物性研究

物性研究所セミナー

標題：Classification of classical spin liquid in the large-S limit

日時：2022 年 8 月 22 日(月) 午後 1 時 30 分～午後 2 時 30 分

場所：柏図書館メディアホール および Online

講師：Dr. Han Yan

所属：Rice University

要旨：

Classical spin liquids are arguably one of the most interesting types of classical matter. They are described often by the classical limit of gauge theories (electrostatics) and can be upgraded to topological orders or gapless quantum liquid states if equipped with proper quantum dynamics. In this work, we present a classification scheme for classical spin liquids in the large-S limit. In this limit, the spin components are effectively real scalars, so the spectrum of the Hamiltonian accurately describes its properties. We found that the ground state degeneracy corresponds to flat bands at the bottom of the spectrum, and the flat band's structure crucially decides the physics of the classical spin liquid. When there is a singular band-touching between the top bands and the bottom flat ones, the system has algebraic correlation. The ground state is then described by a generalized Gauss's law, whose algebraic form is determined by the band touching structure. A much less studied category is when the flat bands are gapped from the top ones. In this case, the correlation is short-ranged, but the classical spin liquid can be distinguished from a trivial paramagnet by the fragile topological homotopy of the bottom bands. Besides building the general mathematical framework of the classification, I also show some concrete examples and discuss experimental applications.

標題：Atom-by-atom electron spin resonance: towards electron spin qubits on a surface

日時：2022 年 9 月 9 日(金) 午後 2 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 4 セミナー室 (A614)

講師：Soohyon Phark 博士

所属：Institute for Basic Science and Ewha Womans University

要旨：

Addressability to individual atoms and atom-by-atom position control using a scanning tunneling microscope (STM) [1] opens the bottom-up design of functional quantum devices. As an extension of such potential to atomic/molecular spins, STM can provide a platform of solid state qubits [2,3], which is unique in the sense of bottom-up design of qubit systems of a scale ~ 1 nm, with advantage of atom precision control of structure and inter-qubit couplings [4]. Here, I first introduce a recent advance of STM by combining conventional electron spin resonance (ESR), which picks up the advantages of the two techniques, high spatial resolution of STM and high energy resolution of ESR, enabling to drive and detect spin resonance of individual atoms on surfaces. Then, I continue a successful implementation of pulsed-ESR into STM to coherently control individual atomic [5] and molecular [6] spins on surface, paving a way towards on-surface electron spin qubits at the atomic scale. So far, the quantum coherence of such spin qubits is limited by $\lesssim 100$ ns, requiring a noticeable improvement for their practical applications. In this regard, I briefly suggest some feasible ideas to protect such spin qubits from the environmental decoherence, to narrow down the direction and brighten a way to raise the on-surface qubits up to a stage of the quantum-coherent applications [4].

References:

- [1] D. M. Eigler, E. K. Schweizer, Nature 344, 524–526 (1990).
- [2] A. J. Heinrich et al. Nat. Nanotechnol. 16, 1318–1329 (2021).
- [3] S. Thiele et al. Science 344, 1135–1138 (2014).
- [4] Y. Wang et al. arXiv:2108.09880; under review (2022).
- [5] K. Yang et al. Science 366, 509–512 (2019).
- [6] P. Willke et al. ACS Nano 15, 17959–17965 (2021).

標題：磁性量子流体における孤立した半整数スキルミオン

日時：2022 年 9 月 21 日(水) 午後 1 時 30 分～午後 2 時 30 分

場所：Online

講師：竹内 宏光 講師

所属：大阪公立大学大学院理学研究科 物理学専攻

要旨：

スキルミオンは自発的対称性の破れを伴う相転移の結果生じる位相欠陥の一種である。磁性系で知られる磁気スキルミオンは、電子が電荷を運ぶ粒子であるように、磁化ベクトル場中の特徴的な模様（テクスチャー）を運ぶ粒子（ソリトン）と見なせる。一つのスキルミオンが運ぶ‘電荷’（位相不変量）は位相幾何学的に量子化されており、‘電荷’の最小単位である‘素電荷’をもつスキルミオンのテクスチャー内の磁化ベクトル場は取り得る方向（球面）を‘1 回覆う’。本研究では、 ${}^7\text{Li}$ の冷却原子気体ボース・アインシュタイン凝縮の磁性量子流体中の磁気スキルミオンが、‘素電荷’の半分の‘電荷’をもち得ることを示す。我々はこの構造を偏心半整数スキルミオン(EFS: Eccentric Fractional Skyrmion)[1]と呼んでいる。EFS はベクトル場の特異点として‘偏心軸’を有することでそのテクスチャーは球面を‘半回覆う’。この性質により EFS は孤立して存在できるという点で、対としてしか存在できないメロン（特徴的なテクスチャーの一種）と明確に区別されるべきである。EFS の具体的な生成機構として、磁壁上で生じるあるスピン流の不安定性（流体力学で知られるケルビン・ヘルムホルツ不安定性の量子流体系の対応物）を提案し、その非平衡ダイナミクスにおいて多数の EFS が生成されることを数値的に示す。

標題：ダイヤモンド中空素空孔中心を用いた量子センシング

日時：2022 年 9 月 29 日(木) 午後 1 時 30 分～午後 2 時 30 分

場所：Online

講師：佐々木 健人

所属：東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻

要旨：

本来は無色透明であるダイヤモンドは、その中に発光を示す点欠陥が含まれる場合、カラーダイヤモンドと呼ばれるようになる。ダイヤモンドには百種類を以上の欠陥が発見されているが、その中でも特に、窒素空孔(NV)中心という赤色発光を示す欠陥に近年注目が集まっている。

NV 中心には電子スピンと光学遷移が相関する特別な性質がある。我々はこの性質を利用して NV 中心の電子スピンを初期化、読み出し、量子操作できる。また、顕微鏡を用いれば単一 NV 中心でも検出できるため、単一量子ビットとして利用できる。2008 年以降、NV 中心を磁場[1]や温度[2]のセンサーとして利用する量子センシング研究が世界中で行われるようになった。この技術は、量子操作を駆使し、局所的な磁場や温度による単一電子スピンのエネルギーシフトを精密測定することで実現される。従来法では達成が困難な高い空間分解能、感度、定量性が同時に得られる画期的な技術である。特に、NV 中心のセンサー動作は、極低温から室温を超える高温、10 GPa を超える超高圧環境でも保たれる。最近

本発表では、NV 中心の基本的な性質、磁場や温度の計測原理、量子操作の方法や発展などを説明した後、我々が東京大学小林研で進めている物性計測応用について紹介した。

- # **標題：サブサイクル光電場 ARPES で見る高強度現象**

場所：Online

所属：フィリップス大学マールブルク

角度分解光電子分光(ARPES)は物質のバンド分散を直接観測する強力な手法である。超短パルスレーザーによるポンプ-プローブ分光法と組み合わせることで、超高速ダイナミクスの観測も可能にする。これまで測定の時分解能はポンプ光のサイクル時間よりも長いスケールに留まっていたが、近年、サイクル時間の長いテラヘルツ(THz)領域のポンプ光を使うことで、サブサイクル分解能での時間分解 ARPES が実現された[1]。

本発表では、このサブサイクル ARPES を中赤外光（周波数 20-40THz）の領域に拡張した最近の実験を紹介する。トポロジカル絶縁体 Bi₂Te₃ 表面での電場強度は MV/cm 領域に到達し、光電場で駆動される超高速電流とともに、フロッケ状態のサブバンドが光電場のわずか 2 サイクル後に形成される様子が観測された。さらにピーク電場強度においてフロッケバンドの電荷分布がバルクの伝導帯に到達する様子が観測された。これはバンド内電流と（非摂動）バンド間励起の協奏という高強度現象の微視的過程を運動量空間で直接見た初めての例となる。発表では、装置の技術的詳細や理論計算の結果も含めてこれらの結果を紹介した。

- 標題：スピン流によらないスピン Hall 効果・スピン Nernst 効果

場所：Online

所属：分子科学研究所

スピン Hall (Nernst)効果はスピン軌道相互作用を通じて電場(温度勾配)と垂直にスピン流が誘起される現象とされている。これらの現象を利用すれば、一見スピン自由度をもたない非磁性体において磁場を用いることなくスピン流を生成することができるため、スピントロニクス分野で盛んに研究されている。誘起されたスピン流は系の端でスピンへと緩和し、光学的な方法で観測することができる [1]。

スピン軌道相互作用がある場合、スピンは保存せず、スピン流を一意的に定義することはできない。従って、スピン Hall (Nernst) 効果で流れるとされるスピン流とはいったい何なのかという問題が生じる。これまでは尤もらしくスピン流を定義し、スピン Hall 伝導度を計算することがほとんどであった。しかしながら、スピン蓄積が起こる Rashba 模型ではスピン Hall 伝導度が 0 であるので [2], スピン流のみに着目してスピン蓄積を説明することはできない。さらに、スピン Nernst 伝導度に関しては、単に久保公式を計算しただけでは絶対零度に向かって発散するという問題もある。

[1] Kato et al., Science 306, 1910 (2004); Wunderlich et al., Phys. Rev. Lett. 94, 047204 (2005).
 [2] Inoue et al., Phys. Rev. B 70, 041303(R) (2004); Sugimoto et al., Phys. Rev. B 73, 113305 (2006).
 [3] Shitade and Tataru, Phys. Rev. B 105, L201202 (2022); Shitade, Phys. Rev. B 106, 045203 (2022).

[1] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, & T. Higo, *Nature* 527, 212 (2015).
 [2] T. Matsuda et al., *Nature Commun.* 11, 909 (2020).
 [3] T. Matsuda et al., arXiv:2206.06627
 [4] 松田ら、日本物理学会 2022 年秋季大会 15aW242

37 物性研だより第 62 巻第 4 号

Eliashberg-combined electron-phonon functional and plasmonic mass-renormalization. We perform the benchmark calculations to investigate all the above contributions in typical superconducting materials. We find that the latest SCDFE predicts T_c with an error of 30% for various materials (V, Nb, H₃S, CaC₆, V₃Si, etc.), an underestimation of 40-50% for MgB₂ and YNi₂B₂C, and an overestimation of 60%-300% for low- T_c (below 1.2 K) materials (Cd, Zn, and Al). We also report the estimated T_c for newly predicted quaternary hydrides [2].

[1] M. Kawamura, Y. Hizume, and T. Ozaki, Phys. Rev. B 101, 134511 (2020).

[2] R. Koshiji, M. Fukuda, M. Kawamura and T. Ozaki, arXiv:2206.04971.

標題：機械学習を用いた実験データからの有効モデル推定

日時：2022 年 10 月 28 日(金) 午前 11 時～午後 0 時

場所：Online

講師：田村 亮

所属：国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）

要旨：

ベイズ推定を利用した機械学習および計算物質科学手法を組み合わせることで、機械学習による実験データからの有効モデル推定手法を開発してきた。特に測定された磁化過程を入力とし、その物質の磁性有効モデルを推定する手法開発に注力してきた。

実験データから有効モデルを推定するために、有効モデル中で重要なパラメータを選定、その値を決めるための方法論を定式化した。これまで種々開発されてきた計算物質科学手法を用いると、有効モデルが与えられたとき、様々な物理量を計算することができる。この計算を利用すると、有効モデルが与えられた際の測定ノイズを含めた実験データを条件付き確率分布で表すことができる（フォワードモデリング）。ここで、ベイズの定理を用いることで、実験データが与えられた際の有効モデルの事後確率分布が、フォワードモデリングによる条件付き確率と、モデルパラメータの事前分布で表すことができる。これはフォワードモデリングと逆プロセスであり、ベイズモデリングと呼ばれる。事前分布を適切に決めることで、事後確率分布を最大とする有効モデルが最も実験データを説明できるモデルと推定される[Physical Review B 95, 064407-1-8 (2017)].

このように開発された手法の有用性を示すために、実際の実験系への適用として、低次元量子スピン系 KCu₄P₃O₁₂ に対して高磁場測定で得られた磁化過程および帯磁率の実験結果から、スピンハミルトニアンを推定した[Physical Review B 101, 224435 (2020)]. その結果、推定されたスピンハミルトニアンは、実験データを非常によく再現でき、磁気的相互作用の誤差も見積もることができた。

標題：Going beyond the Adiabatic Approximation – Crystal Field Phonon Interactions in McPhase

日時：2022 年 11 月 8 日(火) 午後 1 時 30 分～午後 3 時

場所：第 5 セミナー室（A615）及び Zoom（ハイブリッド開催）

講師：Dr. habil. Martin Rotter

所属：McPhase Project

要旨：

Commonly the approach to the solid state is based on the adiabatic approximation. I will show some kind of physics which is neglected by this viewpoint: the crystal field phonon interaction is introduced on a simple model of a linear chain of Ce ions. This model is being developed into a numerical ab initio method to study the correlation of phonon and many body electron dynamics. I will focus on the numerical simulation of neutron spectra of some sample systems,

Going beyond the core subject of the seminar there will be room to discuss any other topic of interest within the context of numerical simulations using McPhase including also a short training in using this program package. I will make accessible to the participants of the seminar the new version 5.5 of the McPhase program, which will be tested in an online workshop 17-21 October and which will be published after the Micro-Workshop scheduled 30.Jan-3.Feb 2023 in Venice, Italy (registration deadline 1.Nov.2022). Further Information: www.mcphase.de

細胞運動の再構成が難しい原因の1つは、線維の両端の性格が異なるなど、線維化して初めて出現する機能が理解できていないことである。セミナーでは、線維内の分子同士での伝搬(=クロストーク)やアロステリックな反応を時空間的に顕微計測したデータを示しつつ、日本と米国で働いてきた私の経験についても触れた。

Many-body localization (MBL) occurs in strongly-disordered quantum many-body systems. MBL has been investigated theoretically, numerically, and experimentally. Recently, techniques to probe MBL using quantum devices have been developed, which take advantage of quantum dynamics. This talk focuses on MBL detection methods using numerical simulations of quantum dynamics. The simulation results show how the magnetization and a quantity called twist overlap characterize MBL.

標題：高温超伝導薄膜における超伝導ダイオード効果

日時：2022年11月18日(金) 午前11時～午後0時

場所：Online

講師：土屋 雄司 准教授

所属：東北大学金属材料研究所

要旨：

近年、非相反伝導現象が注目を集めており、光子、電子に加えてスピン流、超伝導電子などへと対象が拡張されている。空間反転対称性が破れた超伝導体では、磁束量子の非相反伝導現象に起因した超伝導ダイオード効果が発現する。この効果は、超伝導薄膜の面内方向に外部磁場を印加することで、比較的簡単に現れる。

本セミナーでは、最近の我々の成果として高温超伝導薄膜における磁束量子に対する表面バリアを用いた超伝導ダイオード効果の発現および応用研究について発表した。

標題：Numerical analysis of the Sachdev-Ye-Kitaev type models

日時：2022 年 11 月 21 日(月) 午後 1 時～午後 2 時

場所：Online

講師：Masaki Tezuka

所属: Kyoto University

要旨：

The Sachdev-Ye-Kitaev (SYK) model, proposed in 2015, is a quantum mechanical model of N Majorana or complex fermions with all-to-all random interactions. The model has attracted significant attention over the years due to its features such as the existence of the large- N solution with maximally chaotic behavior at low temperatures and holographic correspondence to a low-dimensional gravity theory. Numerical diagonalization of the model Hamiltonian gives much insight into the dynamics of the model. We have studied (i) the spectral correlation by computing the spectral form factor [1], and (ii) the scrambling dynamics of the model by using the Hayden-Preskill protocol [2]. In addition to the result for the original SYK model, we present the results for the binary-coupling sparse SYK model [3] and the SYK4+2 model [4].

Reference:

- [1] J. S. Cotler, G. Gur-Ari, M. Hanada, J. Polchinski, P. Saad, S. H. Shenker, D. Stanford, A. Streicher, and M. Tezuka, JHEP 1705:118 (2017) [arXiv:1611.04650]; H. Gharibyan, M. Hanada, S. H. Shenker, and M. Tezuka, JHEP 1807:124 (2018) [arXiv:1803.08050].
- [2] P. Hayden and J. Preskill, JHEP 0709:120 (2007) [arXiv:0708.4025].
- [3] M. Tezuka, O. Oktay, E. Rinaldi, M. Hanada, and E. Nori, arXiv:2208.12098.
- [4] A. M. García-García, B. Loureiro, A. Romero-Bermúdez, and M. Tezuka, Phys. Rev. Lett. 120, 241603 (2018) [arXiv:1707.02197].

Age Group	Percentage
18-24	85%
25-34	75%
35-44	65%
45-54	55%
55-64	45%
65-74	35%
75-84	25%
85+	10%

antimony [4] reveal a narrow temperature window where normal collisions enhance the heat flow rate. The ubiquitous T-square resistivity of Fermi liquids survives in dilute metals in absence of Umklapp events [5], indicating that it does not require momentum-relaxing collisions. Comparing the available transport data in metals and in normal liquid ^3He indicates that energy diffusivity sets the amplitude of T-square thermal resistivity, while momentum diffusivity is the driver of T-square electrical resistivity [6].

- [1] V. Martelli et al., Phys. Rev. Lett. 120, 125901 (2018).
- [2] Y. Machida et al., Sci. Adv. 4, eaat3374 (2018).
- [3] Y. Machida et al., Science 367, 309 (2020).
- [4] A. Jaoui, B. Fauqué, K. Behnia, Nat. Commun. 12, 195 (2021).
- [5] J. Wang et al., Nat. Commun. 11, 3846 (2020).
- [6] K. Behnia, Ann. Phys. 2100588 (2022).

標題：One-dimensional molecular systems with exotic quantum states

日時：2022 年 11 月 24 日(木) 午後 1 時 30 分～午後 2 時 30 分

場所：物性研究所本館 6 階第 2 セミナー室 (A612) & Online

講師：Prof. Pavel Jelinek

所属：Institute of Physics of the Czech Academy of Science

要旨：

Low dimensional materials offer very interesting material and physical properties due to reduced dimensionality. At present, 2D materials are the focus of attention. However, 1D systems often show far more exotic features, such as Tomanaga-Luttinger liquid or Peierls distortion not presented in 3D and 2D materials. However, the study of these 1D systems is strongly limited by our possibilities of their preparation and characterization on atomic scale. Nevertheless, recent progress of UHV on-surface chemistry [1] paved the way for the synthesis of molecular chains with atomic precision. Moreover, scanning probe microscopy represents the unique tool, which enables to characterize their structural and electronic structure with the unprecedented spatial resolution [2].

In this talk, we will briefly discuss several examples of 1D molecular system featuring interesting quantum properties such topological quantum phase and concerted proton tunneling.

In the first part, we will introduce a novel strategy to synthesize [3] a new class of intrinsically quasi-metallic 1D π -conjugated polymers featuring topologically non-trivial quantum states. Furthermore, we unveiled the fundamental relation between quantum topology, π -conjugation and metallicity of polymers [4]. Thus, we will make a connection between two distinct worlds of topological band theory (condensed matter physics) and π -conjugation polymer science (chemistry). We identified and visualized a quantum phase transition between two topologically distinct phases in a π -conjugated polymer. We will demonstrate that pseudo Jahn-Teller effect as the driving mechanism responsible for the quantum phase transition. Finally, we present theoretical simulations revealing coherent fluctuation of polymers of the critical length at finite temperature between two distinct quantum phases. Such calculations provide an “a smoking gun” evidence of possible presence of the quantum criticality phenomena in the π -conjugated polymer found near the phase transition.

In second part, we will demonstrate unusual mechanical and electronic properties of hydrogen bonded chains formed on a metallic surface driven by nuclear quantum effects within the chain [6]. We will show, that the concerted proton tunneling not only enhances the mechanical stability of the chain, but it also gives rise to new in-band gap electronics states localized at the ends of the chain. This study demonstrates the new class of nuclear quantum effects, which concerted character strongly modifies physical and material properties of the system.

- [1] S. Clair, D. de Otyeza, Chem. Rev. 119, 4717 (2019).
- [2] P. Jelinek, J. Phys. Cond. Matt. 29 343002 (2017).
- [3] A. Grande-Sanchez et al. Angew. Chem. Int. Ed. 131 6631 (2019).
- [4] B. Cieria et al. Nature Nanotechnology 15 437 (2020).
- [5] H. Gonzalez-Herrero et al, Adv. Mat. 33, 2104495 (2021).
- [6] A. Cahlik et al. ACS Nano 15 10357 (2021).

3 a) N. Avarvari, J. D. Wallis, J. Mater. Chem. 2009, 19, 4061; b) F. Pop, N. Zigon, N. Avarvari, Chem. Rev. 2019, 119, 8435

研究成果の真価を社会にアピールする工夫を、提案した。

東京大学

発令日	氏 名	部門・施設名等	職 名	備 考
-----	-----	---------	-----	-----

R4.10.1	BOVENSIEPEN UWE	附属極限コヒーレント光科学研究センター	特任教授	デュースブルク＝エッセン大学物理学部 教授より
R4.12.1	田中 未羽子	凝縮系物性研究部門	助教	Massachusetts Institute of Technology Research Laboratory of Electronics Engineering Quantum Systems group Postdoctoral Associateより

R4.11.10	Portugall Oliver	附属国際超強磁場科学研究施設	特任教授	トゥールーズ・グルノーブル国立強磁場研究所 強磁場グループ グループリーダーへ
----------	------------------	----------------	------	--

R4.12.31	河村 光晶	附属物質設計評価施設	助教	東京大学情報基盤センター データ科学研究部門 特任講師へ
----------	-------	------------	----	---------------------------------

物性研だより第 62 巻目録 (第 1 号～第 4 号)

物性研だより第 62 巻第 1 号

- | | | |
|----|---|-------------|
| 1 | トポロジカル反強磁性体におけるスピン蓄積による面直有効磁場の発現
ー垂直磁化膜の高効率な磁化反転へー | 近藤 浩太、大谷 義近 |
| 3 | 電子のスピンを駆動力とするナノモーターの提案 | 加藤 岳生 |
| 5 | 第 15 回分子科学討論会の分子科学会優秀講演賞を受賞して | 西岡 海人 |
| 6 | 第 15 回分子科学討論会の分子科学会優秀ポスター賞を受賞して | 小野塚 洸太 |
| 7 | 2020 年度日本表面真空学会 会誌賞を受賞して | 松田 巖 |
| 8 | 2021 年度日本表面真空学会 会誌賞を受賞して | 吉信 淳 |
| 10 | 日本中性子科学会奨励賞を受賞して | 眞弓 皓一 |
| 12 | 「分子シミュレーション学会学術賞を受賞」 | 樋口 祐次 |
| 13 | 第 3 回強磁場フォーラムフロンティア奨励賞を受賞して | 三宅 厚志 |
| 16 | 物性科学領域横断研究最優秀若手奨励賞を受賞して | 出倉 駿 |

【物性研究所短期研究会】

- 18 ○分子性固体研究の拡がり：新物質と新現象

25 【物性研究所セミナー】

【物性研ニュース】

- 32 ○東京大学物性研究所人事異動一覧
- 34 ○東京大学物性研究所特任研究員公募について
- 36 ○東京大学物性研究所教員公募について
- 38 ○東京大学物性研究所教員公募(女性限定)について
- 40 ○東京大学物性研究所教員公募について

編集後記

物性研だよりの購読について

物性研だより第62巻第2号

- | | | |
|----|--|-------------------------|
| 1 | 偏極中性子散乱による空間反転対称性を持つ磁気スキルミオン物質の磁気構造解析
ー再稼働した JRR-3 からの成果ー | 中島 多朗 |
| 4 | スーパーコンピュータ「富岳」による大規模物性データの自動創出
ー不規則系磁性材料におけるビッグデータの実現ー | 福島 鉄也、赤井 久純、知京 豊裕、木野 日織 |
| 9 | 伝導電子と局在スピン・軌道が織りなす悪魔の調律
ー多極子の衣をまとった電子「多極子ポーラロン」を発見ー | 新井 陽介、黒田 健太、近藤 猛 |
| 12 | 日本生物物理学会学生発表賞を受賞して | 柴田 桂成 |
| 14 | 2022 年度日本表面真空学会 学会賞を受賞して | 松田 巖 |
| 15 | 表面・界面スペクトロスコーピー2021 のスチューデントプライズを受賞して | 川口 海周 |

- | | | |
|----|-----------------|-------|
| 16 | ISSP 学術奨励賞を受賞して | 酒井 明人 |
| 18 | 客員所員を経験して | 林 智広 |
| 19 | 客員准教授を経験して | 稲村 泰弘 |

【物性研究所短期研究会】

- 21 ○機能的走査プローブ顕微鏡の新展開/ Frontier of scanning probe microscopy and related nano science

【ISSP ワークショップ】

- 25 ○高圧セミナー “最近の話題から”

29 【物性研究所談話会】

30 【物性研究所セミナー】

【物性研ニュース】

- 36 ○東京大学物性研究所人事異動一覧
 38 ○令和3年度外部資金の受入について
 40 ○東京大学物性研究所教員公募について

編集後記

物性研だよりの購読について

物性研だよりの第 62 巻第 3 号

- | | | |
|----|--|-------------------|
| 1 | 「引っ張ると頑丈になる高強度ゲル」をより簡便に作る | 眞弓 皓一 |
| 2 | らせん状のキラル分子は熱で磁石になる
一温めると磁化が大きくなる磁石を発見 | 近藤 浩太、大谷 義近 |
| 4 | 防汚・抗菌効果によりプラスチック代替紙素材を保護する超越コーティング | 廣井 善二、浜根 大輔、柴山 充弘 |
| 7 | 世界初「光で駆動する巨大イオンチャネルタンパク質」を藻類から発見 | 井上 圭一、永田 崇、今野 雅恵 |
| 11 | ISSP Young Scientist Medal | Mingran Xu |
| 13 | 日本物理学会の若手奨励賞を受賞して | 鈴木 剛 |
| 14 | 日本物理学会若手奨励賞を受賞して | 神田 夏輝 |
| 16 | 文部科学大臣表彰 若手科学者賞を受賞して | 眞弓 皓一 |
| 18 | 日本物理学会学生優秀発表賞（領域 9）
及び NanospecFY2021mini ショートプレゼンテーション学生賞金賞を受賞して | 尾崎 文彦 |
| 20 | 日本物理学会学生優秀発表賞を受賞して | 柴田 桂成 |
| 22 | 物性研に着任して | 岡本 佳比古 |
| 24 | 物性研に着任して | 井手上 敏也 |
| 25 | 外国人客員所員を経験して | Matthias Batzill |
| 27 | 【研究会報告】
○物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」 | |
| 30 | 【ISSP ワークショップ】
○「1000 テスラ超強磁場科学の開拓」開催報告 | |
| 34 | 第 67 回物性若手夏の学校開催報告 | 井原 悠雅 |
| 39 | 【物性研究所談話会】 | |

41 【物性研究所セミナー】

【物性研ニュース】

52 ○東京大学物性研究所人事異動一覧

53 ○東京大学物性研究所 特任専門職員(特定有期雇用教職員)募集要項

55 ○東京大学物性研究所教員公募について

編集後記

物性研だよりの購読について

物性研だより第 62 巻第 4 号

- 1 第一原理強相関手法により明らかにした量子スピン液体候補物質 Pd(dmit)_2 塩の性質 井戸 康太、吉見 一慶
- 4 高精度ミラーと計算を組み合わせた軟 X 線顕微鏡を開発
ーラベルフリーで細胞内の微細構造を 50nm の分解能で可視化ー 木村 隆志、竹尾 陽子
- 6 北海道の砂白金から発見された新種の鉱物、苫前鉱 浜根 大輔
- 10 スキルミオン人工知能素子
ースキルミオンを用いた画像認識ー 横内 智行、大谷 義近
- 13 FFLO 超伝導が創る空間的異方性 今城 周作
- 16 ノンコリニア反強磁性体におけるピエゾ磁気効果による異常ホール効果の符号スイッチングの観測
肥後 友也、Muhammad Ikhlas、中辻 知
- 19 「テラヘルツ科学の最先端 VIII」最優秀若手研究者賞を受賞して 室谷 悠太
- 21 MagnEFi conference 2022 の Prize of Best Scientific Poster を受賞して 石川 卓門
- 23 外国人客員所員を経験して Oliver Portugall
- 26 令和 4 年度 物性研究所一般公開の報告 川島 直輝

【物性研究所短期研究会】

30 ○理論タンパク質物性科学の最前線：理論と実験との密な協働

33 【物性研究所談話会】

34 【物性研究所セミナー】

【物性研ニュース】

45 ○東京大学物性研究所人事異動一覧

46 物性研だより第 62 巻目録（第 1 号～第 4 号）

編集後記

物性研だよりの購読について

編集後記

1 件目の研究紹介では、ニューラルネットワークを活用した強相関第一原理計算による量子液体スピン相の安定性とその性質を明らかにした成果で、4 件目の記事では、今度はニューラルネットワークの素子に対して、スキルミオンを利用した成果になっています。ニューラルネットワークについてはお恥ずかしながら勉強不足を痛感したところです。2 件目の木村先生の軟 X 線顕微鏡の開発記事は、今年度の一般公開のサイエンスカフェの中でも紹介されていて ISSP チャンネルの方でもご覧なれますので、是非。さて、今号でとても印象的な記事は 3 件目の苫前鉦のお話です。北海道での鉦物から柏の葉へ、そして、町おこしに（？）と、鉦物発見にまつわるストーリーが展開されています。万年筆のペン先で北海道産の砂白金と似た組成のあるメーカーはどこだろうと気になるところです。5 件目の記事では、FFLO への執念というか熱い思いが感じるのは私だけでしょうか？最後の記事では、物性研だよりでは数多く掲載されてきた Mn_3Sn の成果で、今回は、歪みの効果を利用し制御した成果で、今号も読み応えのある記事ばかりです。

一般公開委員の川島委員長の記事にありますように、今年度も一般公開はオンラインでの開催となりました。来年度はオンサイト開催が可能となるか、なるとしても、前回を知る学生さんも少なく 3 年のブランクは、と考えると不安なところです。

鈴木

【第 62 号第 3 号の訂正について】

令和 4 年 10 月に発行しました「物性研だより第 62 巻第 3 号」につきまして、下記の通り記載に誤りがございました。

P13 「日本物理学会の若手奨励賞を受賞して」

(誤) 極限コヒーレント光化学研究センター 近藤研究室助教 鈴木剛

(正) 極限コヒーレント光科学研究センター 岡崎研究室助教 鈴木剛

訂正の上、お詫び申し上げます。

物性研だよりの購読について

物性研だより発行のメール連絡を希望される方は共同利用係まで連絡願います。

また、物性研だよりの送付について下記の変更がある場合は、お手数ですが共同利用係まで連絡願います。

記

1. 送付先住所変更（勤務先⇔自宅等）
2. 所属・職名変更
3. 氏名修正（誤字脱字等）
4. 配信停止
5. 送付冊数変更（機関送付分）
6. メール配信への変更

変更連絡先：東京大学物性研究所共同利用係

〒277-8581 柏市柏の葉 5-1-5

メール：issp-kyodo@issp.u-tokyo.ac.jp