

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、7Li 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 を超える超高压環境でも保たれる。最近

では、これらの利点を生かして物性計測へ応用する研究が始まっている[3]。

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。

[1] J. M. Taylor et al., Nat. Phys. 4, 810 (2008).

[2] G. Kucsko et al., Nature 500, 54 (2013).

[3] F. Casola et al., Nat. Rev. Mater. 3, 17088 (2018).

標題：サブサイクル光電場 ARPES で見る高強度現象

日時：2022年9月29日(木) 午後0時15分~午後1時15分

場所：Online

講師：伊藤 俊

所属：フィリップス大学マールブルク

要旨：

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、フロック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ク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。

[1] J. Reimann et al., Nature 562, 396 (2018).

標題：スピン流によらないスピン Hall 効果・スピン Nernst 効果

日時：2022年10月17日(月) 午後3時~午後4時

場所：Online

講師：下出 敦夫

所属：分子科学研究所

要旨：

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。

本講演では、スピン流の定義の問題について解説した後、実験で観測できるスピンの着目した定式化を提案する [3]。電場(温度勾配)の勾配は端でピークをもつため、これらに対するスピンの応答はスピン蓄積を直接記述することができる。この定式化では一般化された Mott の関係式や Onsager の相反定理がほぼ自明なものとして従うほか、上述の Rashba 模型についても非零の応答係数が得られ、スピン蓄積を説明することができる。

[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 Tatara, Phys. Rev. B 105, L201202 (2022); Shitade, Phys. Rev. B 106, 045203 (2022).

標題：ワイル反強磁性体 Mn₃Sn におけるテラヘルツ異常ホール効果の超高速非平衡ダイナミクス

日時：2022 年 10 月 20 日(木) 午後 0 時 15 分～午後 1 時 15 分

場所：Online

講師：松田 拓也

所属：極限コヒーレント光科学研究センター 松永研 学振 PD

要旨：

ワイル反強磁性体 Mn₃Sn は、反強磁性スピンをテラヘルツ帯で駆動できるその高速性に加えて、強磁性体並みの巨大異常ホール効果を室温で示す[1]ことから、高速スピントロニクス素子開発の候補物質として大きな注目を集めている。本講演では、我々が進めてきた Mn₃Sn における異常ホール効果のテラヘルツ高速ダイナミクスに関する研究を紹介する。

我々はテラヘルツ波を高精度に偏光分解して計測する装置を開発して、テラヘルツ帯で巨大異常ホール効果を観測することに成功し、反強磁性磁気秩序をサブピコ秒の時間に電流ベースで読み出せることを明らかにした[2]。次に、光励起して磁気構造が高速変化する非平衡下の異常ホール効果の振る舞いを理解するため、ポンププローブ分光測定を行った。その結果、サブピコ秒の超高速領域の異常ホール効果は、磁気モーメントではなく電子分布の変化で決まることを明らかにした[3]。さらに高密度励起することで極端な非平衡状態を作ると、有効質量が 10 倍以上軽いキャリアが出現し、異常ホール効果よりも正常ホール効果の方が支配的になることを発見した。これは高密度励起されたキャリアにより多体相関が遮蔽されてバンド構造が大きく変化した可能性を示唆している[4]。

[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

標題：Benchmark and application of density functional theory for superconductors

日時：2022 年 10 月 28 日(金) 午後 4 時～午後 5 時

場所：Online

講師：河村 光晶

所属：東京大学物性研究所

要旨：

Density functional theory for superconductors (SCDFT) is a method to compute superconducting transition temperature (T_c) without empirical parameters. We formulate a method to compute the spin-fluctuation mediated interaction with the ultrasoft pseudopotentials and implement this method into our first-principles code Superconducting-Toolkit [1]. This implementation enables us to calculate T_c using carefully constructed pseudopotentials such as the Standard Solid-State Pseudopotentials. We also implement the recently proposed

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、磁氣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,

e.g. Tb₂Ti₂O₇, PrNi₂Si₂. Such model calculations can be done with the newest version of the McPhase software package for magnetism.

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

標題：生体高分子アクチンの加齢と重合ダイナミクスの顕微イメージング —Women's week によせて—

日時：2022年11月17日(木) 午前10時～午前11時30分

場所：Online

講師：藤原 郁子

所属：長岡技術科学大学

要旨：

アクチンは真核細胞に大量に存在するタンパク質で、モノマーとポリマー(線維)状態を遷移して細胞分裂や前進運動、形維持などの細胞の運動機能を担う。細菌でも似た形のタンパク質があることから、アクチンのようなタンパク質は、かなり初期の生命から使われてきたと思われる。

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。

標題：Many-body localization detection based on quantum dynamics

日時：2022年11月18日(金) 午後4時～午後5時

場所：On Zoom and Lecture Room A632, ISSP (Hybrid)

講師：Prof. Kazue Kudo

所属：Ochanomizu University/ Tohoku University

要旨：

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].

標題：「光受容タンパク質ロドプシンの発色団異性体の多様性」「三次元ディラック半金属 Cd3As2 におけるフロケ状態の光応答探索」

日時：2022年11月21日(月) 午後1時～午後3時

場所：Online

講師：永田 崇 氏 (井上研究室 助教)、室谷 悠太 氏 (松永研究室 特任研究員)

所属：物性研究所

要旨：

1. 永田 崇 氏 (物性研究所 井上研究室 助教)

【題目】

光受容タンパク質ロドプシンの発色団異性体の多様性

【概要】

動物や様々な微生物の細胞膜に存在する光受容タンパク質ロドプシンは、これまでに膨大な数の分子が同定されており、細胞の光センサーや、細胞膜を通じたイオン輸送など多様な機能を示す。ロドプシンは発色団としてレチナールを結合しており、このレチナールの光異性化が引き金となってタンパク質全体の構造変化が生じ、生物学的な機能が発現する。動物ロドプシンは主に 11 シス型レチナールを結合し、全トランス型へ光異性化する。一方、微生物ロドプシンでは主に全トランス型を結合し、13 シス型への光異性化を示す。本講演では、これらとは異なる非典型的な発色団異性化特性を示す動物・微生物ロドプシンの発見や機能、分子メカニズムに関する話題を中心に、これまでの研究について紹介した。

2. 室谷 悠太 氏 (物性研究所 松永研究室 特任研究員)

【題目】

三次元ディラック半金属 Cd3As2 におけるフロケ状態の光応答探索

【概要】

フロケ・エンジニアリングの考え方により、光による電子状態のトポロジー制御など多くの興味深い現象が予想されているが、理論研究が大きく先行する一方で実験的検証はいまだ不十分である。本研究ではトポロジカル半金属の一種である Cd3As2 を高強度マルチテラヘルツ光で駆動し、分光学的にフロケ状態の応答を探った。その結果、励起光の周波数と同程度のマルチテラヘルツ帯ではフロケ状態間の共鳴に由来する誘導レイリー散乱、DC に近いテラヘルツ帯では電場下の光学遷移に由来する円偏光誘起異常ホール効果が観測された[1,2]。いずれも従来の予測とは異なっており、理論との比較から、これまで軽視されていた重要な光応答が関与していることを明らかにした。

[1] Y. Murotani*, N. Kanda* et al., Phys. Rev. Lett. in press. (*equal contribution)

[2] 室谷ら、日本物理学会 2022 年秋季大会、講演番号 15aW242-4。

標題：T-square thermal resistivity and quasi-particle hydrodynamics

日時：2022年11月22日(火) 午後3時～午後4時

場所：第5セミナー室

講師：Kamran Behnia 氏

所属：ESPCI Paris (Paris Sciences et Lettres University, France)

要旨：

Heat travels in solids thanks to mobile electrons and phonons. Even in a defect-free solid, collisions degrade the flow due to the presence of the lattice. However, there are situations where most collisions for phonons, for electrons or for both conserve momentum. In this hydrodynamic regime, the quasi-particle viscosity plays a significant role. Recent studies of thermal transport in a variety of solids such as strontium titanate [1], black phosphorus [2], graphite [3], and



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 Tomonaga-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.

References

- [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. Cierra 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).

標題: Chiral Electro- and Photoactive Materials

日時: 2022年11月24日(木) 午後3時~午後4時

場所: 第5セミナー室 (A615) 及び Online

講師: Dr. Narcis Avarvari

所属: Laboratoire MOLTECH-Anjou, CNRS - Université d' Angers, France

要旨:

Chirality manifests itself in many areas of physics, chemistry and biology, where objects or materials can exist in two non super-imposable forms, one being the mirror image of the other. 1 Introduction of chirality into conducting systems is a topic of much current interest as it allows the preparation of multifunctional materials in which the chirality might modulate the structural disorder or expresses its influence through the electrical magneto-chiral anisotropy effect. 2 The access to various chiral electroactive precursors for molecular conductors is therefore of paramount importance. 3 In the same time, the most distinctive manifestation of chirality in chemistry is in the optical activity of chiral compounds, expressed as optical rotation or circular dichroism (CD). Additionally, when a chiral compound is emissive, circularly (CPL) can be expected to occur. In this lecture several chiral conducting or photoactive systems will be discussed.

- 1 G. H. Wagnière, On Chirality and the Universal Asymmetry 2007, Wiley-VCH, Weinheim.
- 2 F. Pop, P. Auban-Senzier, E., Canadell, G. L. J. A. Rikken, N. Avarvari, Nat. Commun. 2014, 5, 3757.
- 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

標題: 書かれてなんぼ、プレスリリースの真価とは

日時: 2022年11月29日(火) 午後3時半~午後4時半

場所: 物性研究所本館6階 大講義室 (A632)

講師: 山本 佳世子

所属: 株式会社日刊工業新聞社・論説委員兼編集委員

要旨:

文部科学省記者クラブ在の記者として日々、大量のプレスリリースがチラと見られただけでゴミ箱に行く状況を、悩ましく感じています。

「研究者が論文発表と同じ気持ちでは、どのメディアにも取り上げられずに終わるだけなのに、残念だと思わないのだろうか?」「リリース原案を作成した研究者も、手配に動いた事務方も、無駄なエネルギーを費やしている状態、よしとしているのだろうか?」と。

本講演では、非専門家のメディア人に響くリリースのコツを伝授。

研究成果の真価を社会にアピールする工夫を、提案した。

標題：自然言語の統計力学モデルにおける相転移
日時：2022年12月2日(金) 午後4時～午後5時
場所：Online
講師：中石 海
所属：東京大学大学院総合文化研究科

要旨：

自然言語の振る舞いは非常に多様だが、その文法的側面にのみ注目するならば極めて規則的である。自然言語の文法的側面を数理的に定式化することを目指すのが形式言語理論である[1]。この理論においては、文は有限個の記号からなる文字列として、文法は文を生成する手続きを定める規則の集合として定義される。このように形式的に定義された文法は素朴なやり方で確率的に拡張することができ、この拡張されたモデルは、一種の統計力学モデルとみなして物理学的に解析することができる。その一例が DeGiuli によって提案された Random Language Model (RLM)である[2]。彼は RLM の数値解析に基づいて相転移の存在を予想し、この相転移は人間の言語獲得とのアナロジーによって解釈できると主張した。しかし、相転移の存在は十分に裏付けられていなかった。我々は RLM を理論的に解析し、DeGiuli が仮定したよりも一般的な状況において、相転移が存在しないことを証明した[3]。このことは、自然言語の定式化としてより複雑なモデルを考えることの必要性を示唆した。

- [1] N. Chomsky. Three models for the description of language. IRE Transactions on Information Theory, 2(3):113, 1956.
- [2] E. DeGiuli. Random language model. Phys. Rev. Lett., 122(12):128301, 2019.
- [3] Kai Nakaishi and Koji Hukushima. Absence of phase transition in random language model. Phys. Rev. Research, 4:023156, 2022.

標題：Symmetry-enforced band topology
日時：2022年12月6日(火) 午後4時～午後5時
場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)
講師：Dr. Moritz Hirschmann
所属：Max-Planck Institute for Solid State Research

要旨：

Topological band crossings in energy spectra are connected to the emergence of prominent effects, for example, the anomalous Hall effect and Fermi arc surface states, which appear as open Fermi surfaces on the boundary of the system. In this talk I will present symmetry-based approaches to infer the existence of various point, line, and plane crossings as well as weak insulator topology.

Crystalline symmetries do not just protect but may also enforce a specific band topology. I will discuss the close connection between the chirality of point crossings and the rotation eigenvalues. While the existence of crossings pinned to high-symmetry positions can be easily obtained from the representations of the corresponding little groups, I will give some examples of movable crossings within the Brillouin zone. These results can then be combined to infer, for example, the topology of nodal planes.

Further, I will present some of our efforts to give a comprehensive overview of enforced band structures in orthorhombic and tetragonal space groups, including, for example, almost movable nodal lines, nodal chains, and (topological) nodal planes. We propose example materials and I will touch upon the topological nodal planes in ferromagnetic MnSi, and double Weyl points in NbO₂/TaO₂.