

# 物性研究所セミナー

標題 : Interfaced organic semiconductors: Thermally-activated self- assembly and in-situ oxidation of reduced decaazapentacenes

日時 : 2022 年 12 月 12 日(月) 午後 2 時 –

場所 : 物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師 : Prof. Thomas Jung

所属 : Swiss Nanoscience Institute and University of Basel

要旨 :

Organic semiconductors make cheap, flexible and environmentally friendly electronic devices which do not rely on doping by rare elements. Applications range from OLED displays and solar cells to e-Paper and logic or display circuitry embedded in everyday devices. The intrinsic electronic properties of the material and its interaction with contacting interfaces is important to understand and tune the device characteristics and functionality.

Pentacene and its chemical derivatives are not only the “small molecule” organic semiconductor with the highest intrinsic mobility, but also provide a model system to investigate local chemical and physical properties at surfaces. [2] It is remarkable, that single molecular layers can be operated and doped in thin film transistors (TFTs) [3-5] and that the molecular packing in the monolayer modifies the Shockley surface state in contacting metal substrates [6, 7]. Pyrazinacenes, on the other hand are a newly synthesized class of molecules which complement to p-type pentacene derivatives with their closely related molecular structure and their nitrogen (N) content. [1] We report on the supra-molecular interactions and self-assembly of octa-azatetracene and deca-azapentacenes, two different lengths molecules in this class. The compounds are imaged individually and form structurally related chains. Their oxidation on-surfaces is compared to the dehydrogenation in solution. Experimental evidence is provided by Scanning Tunneling Microscopy and X-ray Photoelectron Spectroscopy and temperature dependent transport experiments of planar thin film transistors with an active channel region of 1-3 molecular monolayers.

## References

- [1] D. Miklik, et al. *Communications Chemistry* 2021, 10.1038/s42004-021-00470-w
- [2] K. Mueller et al., *J. Phys Chem C*, 116, 2012, 10.1021/jp308058u
- [3] C. Vanoni, et al. *Appl. Phys. Lett.* 2009, 94, 253306. 10.1063/1.3159835
- [4] C. Vanoni, et al. *Appl. Phys. Lett.* 2007, 90, 193119. 10.1063/1.2738382
- [5] T. Hählen, et al., *Appl. Phys. Lett.* 2012, 101, 033305, 10.1063/1.4737214
- [6] K. Mueller et al., *Phys Rev. B* 79, 245421, 2009, 10.1103/PhysRevB.79.245421
- [7] A. Scheybal et al., *Phys Rev. B* 79, 115406, 2009, 10.1103/PhysRevB.79.115406

**標題：パルス強磁場を活用した分子性導体の研究**

**日時：2022年12月16日(金) 午後2時 – 午後3時**

**場所：Online**

**講師：今城 周作 特任助教**

**所属：物性研究所 金道研究室**

**要旨：**

分子性化合物は「弱い分子間力を起源とした積層構造」と「分子の自由度を有する」という特徴をもつ。前者の特徴は敏感な外場応答や低いエネルギースケールの物理現象に繋がるため、強磁場を活用することで磁場に鈍感な物性であっても極限状態へ実験的にアクセスすることができる。また後者は、多彩な分子設計や分子形状に依存した特異な分子配列・結晶構造を生み出すことで、多くの興味深い量子現象が現れる基盤となる。一方で、分子性化合物は、その結晶合成に多くの専門的な技術が必要であり、更に弱い分子間力による積層に起因した柔らかい結晶であるため、実験的には取り扱いが困難である。そのため分子性化合物のパルス強磁場研究は盛んではない。

本講演では、私たちが近年進めてきた分子性化合物のパルス強磁場研究の中でも特に(超)伝導性を示す電荷移動錯体の強磁場量子物性の研究成果を中心に紹介した。

**標題：「3次元ディラック物質 Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub>における光誘起カイラルゲージ場」「テラヘルツエレクトロニクスを用いたグラフェンにおける超高速光電変換過程の計測」**

**日時：2022年12月19日(月) 午後1時 – 午後3時**

**場所：Online**

**要旨：**

**1. 吉川 尚孝 氏 (東京大学 理学系研究科 島野研究室 助教)**

**【題目】**

3次元ディラック物質 Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub>における光誘起カイラルゲージ場

**【概要】**

3次元の線形分散を示す3次元ディラック半金属やワイル半金属は、線形分散の交点(ディラック点・ワイル点)の周辺の電子が質量ゼロの相対論的な粒子として振る舞い、特異な伝導特性を示すことから注目を集めている。3次元ディラック半金属に円偏光を照射すると、光の周期電場がディラック電子と結合するカイラルゲージ場として働き、系の時間反転の破れに伴ってディラック点がワイル点ペアへと分裂するフロッケワイル半金属状態が実現することがフロッケ理論に基づいて提案された[1]。我々は、3次元ディラック電子系である常磁性相の Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> を対象に中赤外光ポンプ-テラヘルツ(THz)波プローブ分光を行い、円変光誘起の異常ホール効果が発現することを見出した。実験で得られたポンプ光の強度と周波数の依存性を Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> のフロッケ状態を記述する有効模型と比較すると、円偏光によるカイラルゲージ場がディラックバンドの分裂をもたらし、有限のベリー曲率が生じることで異常ホール効果が現れたことが示唆された[2]。

[1] S. Ebihara, K. Fukushima, and T. Oka, Phys. Rev. B 93, 155107 (2016).

[2] N. Yoshikawa et al., arXiv:2209.11932.

**2. 吉岡 克将 氏 (NTT 物性科学基礎研究所 量子固体物性研究グループ)**

**【題目】**

テラヘルツエレクトロニクスを用いたグラフェンにおける超高速光電変換過程の計測

**【概要】**

超高速かつエネルギー効率の高い光-電気変換は次世代の超高速通信に不可欠な要素技術である。光熱電効果を利用したグラフェン光検出器は、ゼロ暗電流で動作しかつ200GHzを超える動作速度を達成できるとの期待から、新たな光電変



換素子として有望視されている。しかしながら、その期待とは裏腹にこれまでの実証動作速度は約 70GHz に留まっていた。そこで我々は、オンチップ THz 分光法[1]と酸化亜鉛(ZnO) ゲート構造[2]を用いて動作速度の制限を克服し、グラフェン光検出器の動作速度が 220GHz に達することを示した。さらに、光電流のダイナミクスを詳細に調べることで、グラフェンにおける光電変換過程の全貌を定量的に明らかにすることに成功した[3]。

[1] K. Yoshioka et al., Appl. Phys. Lett. 117, 161103 (2020).

[2] N. H. Tu, K. Yoshioka et al., Commun. Mater. 1, 7 (2020).

[3] K. Yoshioka et al., Nat. Photon. 16, 718–723 (2022).

**標題：**【MDCL 合同セミナー】二次元非平衡定常系における連続対称性の破れと相転移

**日時：**2023年1月13日(金) 午後4時 – 午後5時

**場所：**物性研究所本館6階 大講義室(A632)とOnline

**講師：**中野 裕義

**所属：**東京大学物性研究所

**要旨：**

短距離相互作用する二次元平衡系において、連続対称性の自発的破れと結びつく相転移は禁止されている。この結果はマーミン・ワグナーの定理と呼ばれ、ハイゼンベルグスピン系や固体結晶のような幅広い平衡系に対して成立する。

平衡状態を離れ、非平衡定常状態に注目する時、マーミン・ワグナーの定理の対応物は知られていない。さらに、Vicsek モデルのような群れ現象を記述する非平衡モデルにおいて、連続対称性の自発的破れと結びつく長距離秩序が二次元系でも安定に存在できることが 90 年代から知られていた。この結果は、非平衡系では平衡系ほど強く二次元長距離秩序が制限されていないことを示唆している。

講演者は最近、一様せん断流下にある二次元 O(2)モデルの数値的・理論的解析を行い、このモデルが二次元系であっても O(2)対称性の自発的破れと結びつく長距離秩序を持つことを示した[1,2]。このモデルはせん断流を小さくしていくことで平衡系に漸近する。Vicsek モデルのような群れ現象のモデルは平衡極限を持たない。この点で本モデルは非平衡系における連続対称性の破れの起源に関して、見通しの良い議論を行うことができる。

本講演では、Vicsek モデルのような非平衡系で連続対称性の破れが起こるモデルを簡単にレビューし、そのあとで講演者が得た一様せん断流下にある二次元 O(2)モデルの数値解析の結果をまとめながら、連続対称性の破れの起源を議論した[3]。

[1] H. Nakano, Y. Minami, and S. Sasa, Long-Range Phase Order in Two Dimensions under Shear Flow, Phys. Rev. Lett. 126, 160604 (2021)

[2] Y. Minami and H. Nakano, Rainbow Nambu-Goldstone Modes under a Shear Flow, Phys. Rev. Lett. 126, 141601 (2021)

[3] Y. Minami and H. Nakano, Origin of long-range order in a two-dimensional nonequilibrium system under laminar flows, arXiv:2212.06390

**標題：**クライオ1分子ナノスコピーの展望：個々の分子を光で見ることと細胞の中を見るために考えていること

**日時：**2023年1月19日(木) 午前10時 – 午前11時30分

**場所：**物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**講師：**藤芳 暁

**所属：**東京工業大学

**要旨：**

細胞の機能は分子ネットワークによって実現・調整されていると信じられている。しかし、人類はその実体を可視化する方法を持っていない。そこで、我々は分子ネットワークを可視化することを目指してクライオ蛍光顕微鏡を10年余り開発している。その結果、光で個々の分子を見ることの利点や欠点が分かってきた。講演では、最近実証した極低温に冷やした試料にある個々の分子をナノレベルの分解能で観察する方法「クライオ1分子ナノスコピー」について紹介しながら、その展望について議論したい。さらに、ナノスコピーを細胞内観察へ応用するために取り組んでいる研究について紹介した。

**標題：**Kitaev量子スピン液体に対する磁場効果と準粒子励起

**日時：**2023年1月20日(金) 午前11時 – 午後0時

**場所：**Online

**講師：**那須 讓治 准教授

**所属：**東北大学大学院理学研究科

**要旨：**

絶対零度まで磁気秩序を持たない量子スピン液体は、およそ半世紀に渡って磁性分野における主要なテーマのひとつとして研究が続けられている。量子スピン液体候補物質として、三角格子やカゴメ格子など幾何学的フラストレーションを有する格子上の量子スピン系がこれまで主な研究対象だったが、近年、Kitaev量子スピン液体に注目が集まっている。この状態は、Kitaevによって提案された量子スピン模型の厳密な基底状態として実現し、そこからの素励起は、量子スピンの遍歴するマヨラナ粒子と局在するバイゾン励起に分裂したかのような準粒子として記述される。さらに、ある種のイリジウム酸化物やルテニウム化合物がその候補物質として注目され、実験、理論ともに精力的な研究が行われている。Kitaev量子スピン液体のもつ特異な性質のひとつは、磁場によってマヨラナ準粒子系がトポロジカルに非自明になり、非可換エニオンと呼ばれる準粒子が現れることにある。特に最近、Kitaev候補物質  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> の磁場下での物性測定が行われており、磁気秩序が消失し強制強磁性状態になる前に中間相が存在し、そこで磁気励起スペクトルに連続体が現れたり、熱ホール伝導度の半量子化の可能性が指摘されるなど、ホットな話題となっている。本講演では、Kitaev量子スピン液体に対する磁場効果を基礎的なところから概観し、最新の話題も含めて紹介した[1]。

[1] レビューとして Y. Motome and J. Nasu, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 012002 (2020).

**標題：**2-D Terahertz Spectroscopy of Cuprate Superconductors

**日時：**2023年1月23日(月) 午後1時 – 午後3時

**場所：**6F 大講義室 & Online

**講師：**Albert Liu

**所属：**Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter

**要旨：**

Quantum materials, systems in which quantum effects lead to unique macroscopic phenomena with tremendous technological potential, comprise the forefront of condensed matter physics research. In particular, collective



excitations associated with broken-symmetry phases have attracted tremendous attention as powerful windows into their microscopic physics and dynamics. However, spectroscopy of these collective excitations has been hindered by the so-called ‘terahertz gap’, which refers to difficulties in generation and detection of radiation in the terahertz frequency range, where many relevant modes of quantum materials are found.

In response to this challenge, we translate a technique known as 2-D spectroscopy [1], an optical analogue of multi-dimensional NMR spectroscopy, into the terahertz frequency range. We implement, for the first time, 2-D Terahertz Spectroscopy in a non-collinear, reflection geometry, enabling study of opaque materials and isolation of their constituent terahertz nonlinearities. We apply this technique to the Josephson plasma resonance [2] in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , a layered high-temperature superconductor, to distill the underlying plasmon correlations. Measurements of the superconducting transition provide evidence of an unconventional phase-disordering transition without pair breaking. I will conclude with an outlook for light-induced phase transitions.

[1] S. T. Cundiff and S. Mukamel, *Phys. Today* 66 (44), 2013.

[2] Y. Laplace and A. Cavalleri, *Adv. Phys. X* 1 (3), 2016.

標題：ISSP/IPMU/KEK Informal Meeting on “ $\theta=\pi$ ”

日時：2023年1月25日(水) 午後1時 – 午後5時

場所：物性研究所本館 6階 大講義室 (A632)

要旨：

Overview：

The first joint meeting among ISSP/IPMU/KEK theory groups.

The theme is “ $\theta=\pi$ ” in field theories, and its relation to spin systems. There seems to be recent new understandings of physics at  $\theta=\pi$  by using new techniques in numerical computations in field theories. We start with the reviews of how the ground state at  $\theta=\pi$  in 2d field theories has been understood in the past and discuss its relation to 4d Yang-Mills theories. The recently proposed techniques to simulate  $\theta=\pi$  physics and their results will be presented.

Organizers: Ryuichiro Kitano, Norikazu Yamada, Masahito Yamazaki, and Masaki Oshikawa

Program：

13:00-13:20 Speaker: Masaki Oshikawa (ISSP)

Title: Mini introduction to the relation among spin systems, non-linear sigma models and the WZW model

13:20-13:50 Speaker: Masahito Yamazaki (Kavli IPMU)

Title：Relation between 4d  $\text{SU}(2)$  YM and 2d CP1 model

13:50-14:20 Speaker: Norikazu Yamada (KEK)

Title: Gapped or gapless, case of 4d  $\text{SU}(2)$  YM at  $\theta=\pi$

14:20-15:00 Break

15:00-16:00 Speaker: Katsumasa Nakayama (Riken)

Title：Gapped or gapless, case of 2d CP1 at  $\theta=\pi$

16:00-17:00 Discussion



標題：超伝導マイクロ波共振器を用いたグラフェンヘテロ積層超伝導体のマイクロ波応答測定

日時：2023年1月26日(木) 午後0時15分 – 午後1時15分

場所：Online

講師：田中 未羽子

所属：凝縮系物性研究部門 井手上研 助教

要旨：

超伝導体のバンド内電子応答は DC 極限ではゼロ抵抗を示すが有限周波数では電子の慣性に由来する有限のインダクタンスを示し、その値はクーパー対の結合の強さやオーダーパラメータの対称性など様々な特性を反映する。Van der Waals 物質は熱力学的に不安定な構造も含めて多彩なヘテロ構造を作れるという特長があり、近年ではツイストヘテロ積層における強相関状態や超伝導が注目されている[1,2]。

本研究では基板上の2次元マイクロ波共振器と van der Waals 物質を結合するという新しい手法を用いて magic-angle twisted 2 層グラフェンの超伝導相のマイクロ波応答を測定した。共振周波数のシフトから慣性インダクタンスを見積もり、温度やゲート依存性からオーダーパラメータの対称性について議論した。この手法は他の van der Waals 超伝導体にも応用が可能であり、超伝導物性の新たな強力な測定手法としての展望についても説明した。

[1] Y. Cao, et al. Nature, 556, 43 (2018).

[2] JM. Park, et al. Nature, 590, 249 (2021).

標題：Semi-classical simulation of spin-1 magnets

日時：2023年2月1日(水) 午後4時 – 午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Nic Shannon

所属：沖縄科学技術大学院大学 (OIST)

要旨：

Systems based on spin-1 moments exhibit many fascinating properties, as demonstrated by recent work on spin-nematics, Fe-based superconductors, and cold atom systems. However, because spin-1 moments support quadrupoles, they cannot be described using  $O(3)$  vectors, even in the classical limit. For this reason, conventional Monte Carlo and molecular-dynamics simulations fail to describe many of the most interesting phenomena.

In this talk, we introduce a new method of simulating spin-1 magnets at a (semi-)classical level [1]. Our approach is based on a representation of spin-1 moments within the group  $U(3)$ , and allows us to explore the thermodynamics and dynamics of spin liquid and spin nematic phases, as well as conventional magnetic order.

As an applications, we explore the dynamics of the ferroquadrupolar (FQ) phase in the spin-1 bilinear biquadratic (BBQ) model on a triangular lattice, previously discussed as a prototype for unconventional magnetism in NiGaAs, and the spin-1 Kitaev model with competing biquadratic exchange [2].

[1] Kimberly Remund, Rico Pohle, Yutaka Akagi, Judit Romhányi and Nic Shannon, Phys. Rev. Research 4, 033106 (2022)

[2] Rico Pohle, Nic Shannon and Yukitoshi Motome, <https://arxiv.org/abs/2212.10040>



**標題：第一原理電子状態計算による磁性材料のデータ駆動型探索**

**日時：2023年2月3日(金) 午後4時 – 午後5時**

**場所：Online and Lecture Room A632, ISSP(Hybrid)**

**講師：深澤 太郎**

**所属：国立研究開発法人 産業技術総合研究所**

**要旨：**

近年の機械学習手法の発展を背景に、データ駆動型の材料探索手法が注目されている。我々は第一原理電子状態計算によるデータ創出を基軸として新規磁性材料の手法開発に取り組んできたが、このような探索に可用なデータが十分に集積されているとはいえないのが現状である。そこでデータの蓄積を進めていながら、データが少ない場合にも有効な手法から開発していくことが必要だと考えている。

第一原理計算の手法開発はデータの可用性を高める点においても重要である。我々は Korrington-Kohn-Rostoker (KKR) グリーン関数法と Coherent potential approximation (CPA) を組み合わせた手法を用い、ドーブ系などの非化学量論的な系をとりあつかう手法を発展させてきた。とくに磁性材料の開発で重要となる原子サイト間の磁気結合の強さを見積もる手法として Liechtenstein 法に着目し、ドーブ系でのキュリー温度の見積もりや、これまでは不可能であった規模の系のスピン波分散の計算手法を開発へと展開してきた。たとえばネオジム磁石の典型的な主相化合物でありユニットセルに 68 個の原子を含む Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の理論的なスピン波分散を計算し中性子散乱等の実験との比較も可能となった。

またマテリアルズ・インフォマティクスの取り組みとして、初期データがすくない状況でも有効な機械学習の手法であるベイズ最適化に注目した材料探索手法の開発を行っている。また提案材料の実現性に結びつく生成エネルギーの予測手法が重要と考え、多元系において機能性の期待される準安定状態が最安定相と比べてどれだけエネルギー的に乖離しているかを調べる手法の開発を行ってきた。この手法では複数の競合相を同時に考慮することが可能であり、CPA を用いて計算した非化学量論的な系もデータとして用いることができる。これらを実際に磁石化合物系の第一原理計算のデータに適用することで、元素添加が磁石化合物の熱的安定性に与える影響を解析し、未発見の準安定相が存在する可能性について理論的に提案を行った。

**標題：Tip-enhanced Raman Spectroscopy for Nanoscale Chemical Imaging of Surfaces**

**日時：2023年2月8日(水) 午前11時 – 午後0時**

**場所：物性研究所本館 6階 第5セミナー室 (A615)および Online**

**講師：Renato Zenobi**

**所属：スイス連邦工科大チューリッヒ校**

**要旨：**

Tip-enhanced Raman Spectroscopy (TERS) is a nanoscale chemical analysis and imaging method with a spatial resolution of <10 nm, even at ambient conditions [1]. TERS relies on the enhancement of the local electromagnetic field by a plasmonic metal nanostructure that is scanned over the sample by means of a scanning probe microscope, using either AFM or STM feedback. Analogous to SERS, the local electromagnetic field of Raman scattered light is enhanced by many orders of magnitude in TERS, large enough to render monomolecular films and 2D materials spectroscopically visible that would otherwise be optically too thin to be analyzed with conventional vibrational spectroscopy.

In the first part of the presentation, the working principle, experimental realization, and capabilities of TERS will be presented [1]. Several practical aspects will be discussed, including interpretation (and misinterpretation) of TERS spectra due to issues such as tip contamination and sample decomposition triggered by the very high local field under the TERS tip. Recent data from our lab shows that this is due not primarily a thermal effect, but rather due to plasmon-driven, photocatalytic reactions [2]. Strategies to mitigate sample decomposition, for imaging studies of fragile samples

over extended periods of time, and strategies to improve the reproducibility of TERS, especially for investigation of biological samples, will be presented.

In the second part of the presentation, applications of TERS to the spatially resolved chemical analysis and imaging of molecular nanomaterials and surfaces at the nanoscale will be discussed. Examples from recent TERS studies in our laboratory will be chosen, such as two-dimensional polymers [3], biological nanostructures such as amyloid forming proteins, self-assembled monolayers, model membranes, and cell membranes [4, 5], and catalysts [6, 7].

- [1] J. Stadler, T. Schmid, and R. Zenobi, Developments in and Practical Guidelines for Tip-Enhanced Raman Spectroscopy, *Nanoscale* 4 (2012) 1856-1870.
- [2] J. Szczerbiński, L. Gyr, J. Kaeslin, and R. Zenobi, Plasmon-driven Photocatalysis Leads to Products Known from E-Beam and X-Ray-induced Surface Chemistry, *Nano Lett.* 18 (2018) 6740-6749.
- [3] F. Shao, W. Wang, W. Yang, Z. Yang, Y. Zhang, J. Lan, A.D. Schlüter, and R. Zenobi, In-Situ Nanospectroscopic Imaging of Plasmon-Induced Two-Dimensional [4+4] Photopolymerization on Au(111), *Nature Commun.* 12 (2021) 4557.
- [4] Y. Pandey, N. Kumar, G. Goubert, and R. Zenobi, Nanoscale Chemical Imaging of Supported Lipid Monolayers using Tip-Enhanced Raman Spectroscopy, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 50 (2021) 19041-19046.
- [5] D. Mrdenović, W. Ge, N. Kumar, and R. Zenobi, Nanoscale Chemical Imaging of Human Cell Membrane using Tip-Enhanced Raman Spectroscopy, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 61 (2022) e202210288.
- [6] H. Yin, L.-Q. Zheng, W. Fang, Y.-H. Lai, N. Porenta, G. Goubert, H. Zhang, H.-S. Su, B. Ren, J.O. Richardson, J.-F. Li, and R. Zenobi, *Nature Catal.* 3 (2020) 834-842.
- [7] Z.-F. Cai, J.P. Merino, W. Fang, N. Kumar, J.O. Richardson, S. De Feyter, and R. Zenobi, Molecular-Level Insights on Reactive Arrangement in On-Surface Photocatalytic Coupling Reactions Using Tip-Enhanced Raman Spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.* 144 (2022) 538-546.

**標題：半導体ナノ粒子からの高次高調波発生：バンド内電流制御による発生機構解明**

**日時：2023年2月9日(木) 午前11時 – 午後0時**

**場所：物性研究所 D120**

**講師：中川 耕太郎**

**所属：京都大学化学研究所**

**要旨：**

高次高調波発生(HHG)は、アト秒スケールの分光や極端紫外域の光源としての応用が期待され、精力的に研究されている非線形光学現象である。近年では固体からの HHG が観測され、発生効率などが結晶のバンド構造を反映し、気体とは異なる発生メカニズムが提案されている[1]。固体では、バンド間遷移とバンド内遷移の両者により HHG が発生すると議論されているが、実験的にそれらを制御し、HHG 効率を議論した研究はない。そこで我々は、半導体ナノ粒子を用いて、バンド内遷移を制御し、HHG 効率向上と発生機構の解明を目指している[2,3]。ナノ粒子では、量子閉じ込め効果によりサイズで電子状態を制御することができる。異なるサイズのナノ粒子の HHG 効率や実励起キャリア密度を測定し、HHG におけるバンド内遷移の役割を解明した[3]。

- [1] S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L. F. DiMauro and D. A. Reis, *Nat. Phys.* 7, 138 (2011).
- [2] K. Nakagawa, H. Hirori, Y. Sanari, F. Sekiguchi, R. Sato, M. Saruyama, T. Teranishi, and Y. Kanemitsu, *Phys. Rev. Mater.* 5, 016001 (2021).
- [3] K. Nakagawa, H. Hirori, S. A. Sato, H. Tahara, F. Sekiguchi, G. Yumoto, M. Saruyama, R. Sato, T. Teranishi, and Y. Kanemitsu, *Nat. Phys.* 18, 874-878 (2022).





標題：The MPRG

日時：2023年2月15日(水) 午前10時30分 – 午前11時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615) 又は Online

講師：山田 昌彦

所属：学習院大学

要旨：

We have proposed a new framework to solve various quantum many-body problems named a matrix product renormalization group (MPRG) [1]. MPRG solves the sign problem of conventional Monte Carlo methods and can be regarded as generalization of a density matrix renormalization group (DMRG) in one dimension. Compared with DMRG, MPRG is directly applicable to infinite systems, higher-dimensional systems, finite-temperature systems, and even to open quantum systems. In particular, a nonvariational variant of MPRG can be used to simulate non-Hermitian models like the Yang-Lee model with a Yang-Lee edge singularity. A variational variant of MPRG has a further application to many Hermitian systems. By utilizing a continuous projected entangled pair state (cPEPS), we can even solve two-dimensional systems at finite temperature. As for the accuracy, cPEPS outperforms PEPS with about a one-digit-higher precision when the same bond dimension is used. The finite-temperature observables like a specific heat are also calculated and compared with a quantum Monte Carlo simulation. Due to the absence of a sign problem, a Trotter error, or a finite-size effect, the observables can easily be extrapolated to the thermodynamic limit only by the bond dimension scaling.

[1] Masahiko G. Yamada et al., arXiv:2212.13267 (2022).

標題：1分子散乱イメージングによる回転分子モータータンパク質の構造ダイナミクス研究

日時：2023年2月16日(木) 午前10時 – 午前11時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：大友 章裕

所属：分子科学研究所

要旨：

金ナノ粒子を標的の生体分子モーターに結合させ、分子の動きを追跡する1分子散乱イメージングでは、マイクロ秒の時間分解能とオングストロームの位置決定精度を達成することができる(1)。我々はこの手法を2つの回転分子モーターの複合体であるV-ATPaseに適用し、その回転運動を直接可視化することで、V-ATPaseがATP加水分解エネルギーを利用してナトリウムイオンを膜輸送する仕組みの一端を明らかにした(2)。本セミナーでは1分子計測法による生体分子モーター研究の概要、解明したV-ATPaseの回転機構について発表するとともに、最近取り組んでいるV-ATPaseを改造し新たな分子モーターをつくる試みについても紹介した。

(1) Ando J., et al, Biophys. J., 115 (2018)

(2) Otomo A., et al, PNAS, 118 (2022)

標題：Monte Carlo sampling in tensor-network representation

日時：2023年2月20日(月) 午後1時 – 午後2時

場所：Online

講師：藤堂 眞治

所属：東京大学 物理学専攻

要旨：

Many classical and quantum lattice models can be represented as tensor networks. However, the exact contraction of a tensor network is generally exponentially expensive, and some approximation is usually required. In numerical simulations based on the tensor networks, approximations with the singular value decomposition are widely used. On the other hand, various contraction methods based on randomized algorithms have also been proposed. Unfortunately, with a simple weighted sampling, it is difficult to control the accuracy because the expected value variance diverges rapidly as the network grows. In this talk, I propose a new tensor contraction method based on Monte Carlo sampling. The proposed method combines the stochastic basis transformation of tensors with the Markov chain Monte Carlo framework. It can entirely remove the systematic error due to a finite bond dimension in the approximate tensor-network contraction while controlling the variance of measurements.

標題：X線回折で見る多極子秩序

日時：2023年2月24日(金) 午前11時 – 午後0時

場所：Online

講師：田中 良和

所属：理化学研究所 放射光科学研究センター

要旨：

放射光光源の発展によって、いままで見えなかったものが見えるようになってきました。従来の実験室におけるX線回折とは全く異なる次元の世界が広がったといえるでしょう。それは単にX線の強度が、何桁もの強度が上がったことだけでなく、X線の偏光やエネルギーが自由に操作できるようになったことに因ります。

今回、ご紹介するのは放射光光源を用いたX線回折によるCeB6の反強電気四極子秩序の観察とマルチフェロイック物質六方晶フェライトの磁気的な多重秩序変数の観察についての二つのトピックスです。

CeB6は低温で反強四極子秩序相(II相  $T_Q=3.2$  K以下)、反強磁性秩序相(III相  $T_N=2.4$  K以下)を示します。これらの相が特異な温度-磁場依存性を示すことが知られています。ゼロ磁場でのIII相の磁気構造および、その高磁場側のIII相の磁気構造はすでに中性子回折実験によって解明されています。しかしII相の秩序状態はほぼ四半世紀の間不明でした。中性子回折実験を用いて、外部磁場を印加することによって波数ベクトル $[1/2, 1/2, 1/2]$ に対応する反射面で回折強度があることが見つけられており間接的に、反強電気四極子秩序が確認されている状態でした。我々は、放射光光源から得られる大強度のX線によって、Ce 4f 電子一つが織りなす反強電気四極子秩序を確認しました。このX線回折の強度は通常のBragg回折の100万分の1程度です。我々は、磁場中でこの反射を観察することによってCe 4f 電子が形成する電気四極子が磁場によって回転する様子を確認することができました。[1] 六方晶フェライトはマルチフェロイック物質の一種で、電気分極や磁化などの秩序変数が互いに絡み合うことで非自明な電気磁気応答を示すことが知られています。共鳴X線回折を用いると、物質中で形成される複雑な磁気構造、ドメイン構造を可視化することができます。今回ご紹介する物質はY型六方晶フェライト  $Ba_{1.3}Sr_{0.7}CoZnFe_{11}AlO_{22}$  とZ型六方晶フェライト  $Sr_3Co_2Fe_{24}O_{41}$  です。これらの物質はそれぞれ Alternating longitudinal conical (ALC)構造、Transverse conical (TC)構造と称されるユニカル磁気構造を示し、異なる2種類の波数ベクトルで記述される磁気モーメント成分によって構成されることがわかっています。これらの磁気モーメントの各成分がそれぞれ独立した磁気衛星反射、もしくはBragg反射に寄与するため、共鳴X線回折を用いると各磁気モーメント成分を別々に測定することができます。我々は、これらの反射を調べることで、複雑な磁気構



造を 2 つの成分へ分離して観察することに成功しました。これを利用し外部磁場による磁気ドメイン構造への影響を観察することができ、二種類の磁気ドメイン間の結合の有無、すなわち一方の磁気ドメイン制御を介して他方のドメイン構造が同時に制御されるか否かについてそれぞれの六方晶フェライトに対して明らかにすることができました。[2] セミナーでは、多極子の定義、非共鳴 X 線回折、共鳴 X 線回折、円偏光を用いた X 線回折によるカイラリティの判別などについてもご説明しました。

[1] Yoshikazu Tanaka, Koichi Katsumata, Susumu Shimomura, and Yoshichika Ōnuki, “Manipulating the Multipole Moments in CeB6 by Magnetic Fields”, JPSJ, 74, 2201 (2005).

[2] 上田大貴、田中良和、木村剛、“マルチフェロイック物質における共鳴 X 線回折による磁気ドメイン観察”、日本放射光学会誌 33(5) 334 (2020).

標題：「Materials Data Repository(MDR)の開発と運用」「MDR XAFS DB 放射光データの統合と公開はいつまでできたか」

日時：2023 年 2 月 27 日(月) 午後 3 時 – 午後 4 時

場所：物性研究所本館 6 階 大講義室 (A632)

要旨：

1. 田邊 浩介 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

題目：Materials Data Repository(MDR)の開発と運用

概要：Materials Data Repository(MDR)は、物質・材料機構の運用するデータリポジトリであり、材料科学のためのメタデータによる検索や DataCite DOI 付与などの特徴を持っています。この発表では、これらの特徴に加えて、MDR の開発から運用に至るまでの数々の課題への対応、さらに将来の展望についてお話しします。

2. 石井 真史 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)

題目：MDR XAFS DB 放射光データの統合と公開はいつまでできたか

概要：私たちは、SPring-8、立命館大学、北海道大学、KEK と協力して、多機関連携型のデータベース、MDR XAFS DB(<https://doi.org/10.48505/nims.1447>)を作成して、公開しました。データ形式、メタデータの整備状況が全く異なる各機関の X 線吸収分光スペクトルをまとめ上げ、登録機関の違いを全く感じさせることなく横断検索することを可能にした方法について、概要をご紹介します。

標題：脂質分子の枯渇効果によるバクテリオロドプシン 2 次元結晶形成の検討

日時：2023 年 3 月 6 日(月) 午後 2 時 – 午後 3 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：須田 慶樹

所属：九州大学

要旨：

膜貫通型タンパク質は脂質二重層の中に埋まっている。このタンパク質は他の膜貫通型タンパク質と相互作用して、多量体を形成することがある。多量体形成はタンパク質の機能発現に重要であるが、多量体形成の駆動力は明らかにされていない。仮説として、直接の相互作用に由来する水素結合やイオン結合の形成による説明も考えられる。しかしバクテリオロドプシン(bR)のように、それらの結合が見られないタンパク質も存在する。bR は 3 量体を形成する。さらに 3 量体が膜の中で集合して 2 次元結晶を形成する(図 1)。しかし bR 単量体間、3 量体間に水素結合やイオン結合は見られない。本研究では bR の結晶形成に着目して、膜貫通型タンパク質の多量体形成駆動力を研究した。特に駆動力として脂質分子

の枯渇効果の可能性を検討した。

理論研究から検討するにあたり、3量体を形成しない変異型 bR 単量体は、野生型 bR3 量体よりも 10.2 倍も高い濃度でないと結晶形成を開始しないという実験結果に注目した。本研究では bR 単量体と 3 量体の相図をそれぞれ計算し、結晶形成開始濃度(critical concentration: CC)とその比(critical concentration ratio: CCR)を求め、実験結果と比較した。bR3 量体、単量体、脂質分子をそれぞれ剛体円盤へ、生体膜を 2 次元平面へモデル化した。円盤間には直接の引力は働いてなく、脂質分子の枯渇効果による実効引力のみが結晶形成の駆動力になる。ここで、生体膜系を 2 次元系へモデル化した理由は以下の通りである。bR の大部分は疎水的なアミノ酸によって構成されており、膜の疎水部に埋まった状態にある。それゆえ、bR の膜に対して垂直の運動は、bR の疎水部を水中に露出することになりエネルギー的に不利であると考えられる。従って bR の運動は膜に対して側方的な 2 次元的な運動に限定されると考え、bR 結晶形成を 2 次元円盤系での相転移として捉えた。

Free volume theory と thermodynamic perturbation theory それぞれから bR の相図を求め、CCR を計算した。脂質分子を剛体円盤としてモデル化した場合、いずれの理論から計算した CCR も実験結果と半定量的に一致した。このことから、脂質分子の枯渇効果が bR 結晶形成の主要な駆動力である可能性が示唆された。一方、脂質分子を理想気体としてモデル化した場合、理論と実験の CCR は定量的に一致しなかった。このことは脂質分子間の斥力が枯渇効果を高め、膜貫通型タンパク質間相互作用に重要である可能性を示している。

