

物性研だより

BUSSEIKEN DAYORI

第 64 卷

第 1 号

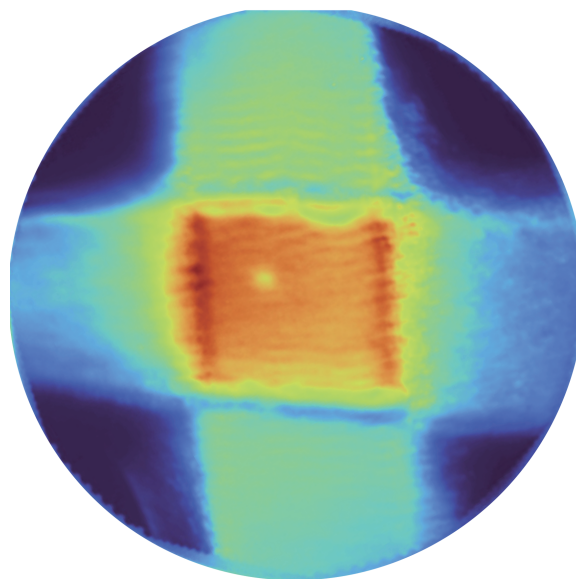
2024 年度

Nodeless electron pairing in CsV₃Sb₅-derived
kagome superconductors

電極に埋もれた強誘電体の絶縁破壊過程を観測
：レーザー励起光電子顕微鏡

グラファイトにおける比熱の 2 重ピーク構造の発見

磁石によるうろこ模様で回る音波を制御
-人工格子デザインで「左回り」「右回り」の読み出しに成功-



東京大学 物性研究所

THE INSTITUTE FOR SOLID STATE PHYSICS
THE UNIVERSITY OF TOKYO

Copyright ©2024 Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo. All rights Reserved.

ISSN 0385-9843

contents

1 Nodeless electron pairing in CsV₃Sb₅-derived kagome superconductors

Yigui Zhong, Kozo Okazaki

4 電極に埋もれた強誘電体の絶縁破壊過程を観測：レーザー励起光電子顕微鏡

藤原 弘和、Cédric Bareille、糸矢 祐喜、小林 正治、谷内 敏之

7 グラファイトにおける比熱の 2 重ピーク構造の発見

小濱 芳允、Zhuo Yang (杨 卓)

10 磁石によるうろこ模様で回る音波を制御

—人工格子デザインで「左回り」「右回り」の読み出しに成功— 大谷 義近、山本 慧

12 第 1 回日本放射光学会高良・佐々木賞を受賞して

原田 慈久

14 日本物理学会 学生優秀発表賞を受賞して

峯 明史

15 第 17 回物性科学領域横断研究会 最優秀若手奨励賞を受賞して

福嶋 拓海

16 エヌエフ基金 第 12 回 (2023 年度) 研究開発奨励賞を受賞して

今城 周作

17 日本膜学会「第 45 年会」・「膜シンポジウム 2023」合同大会学生賞を受賞して

富依 勇佑

18 第 18 回日本物理学会若手奨励賞を受賞して

栗原 貴之

20 「Outstanding referee」, 「若手優秀発表賞」を受賞して

山田 暉馨

22 物性研に着任して

川畑 幸平

【物性研究所短期研究会】

23 ○「熱電材料の高性能化はどこまで行くか」開催報告

【ISSP ワークショップ】

27 ○「表面界面スペクトロスコピー 2023」

29 ○ISSP Women's Week 2023

32 【物性研究所談話会】

34 【物性研究所セミナー】

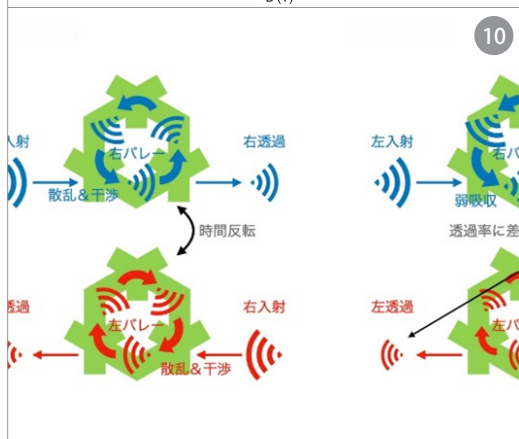
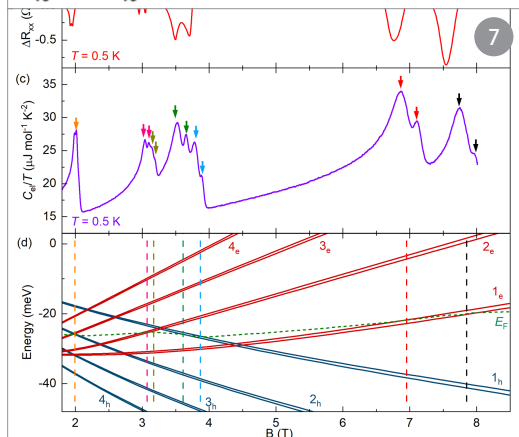
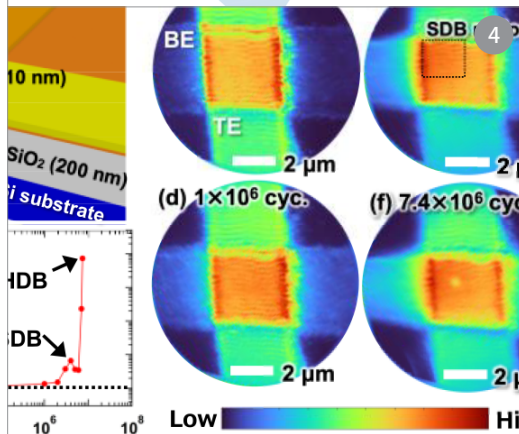
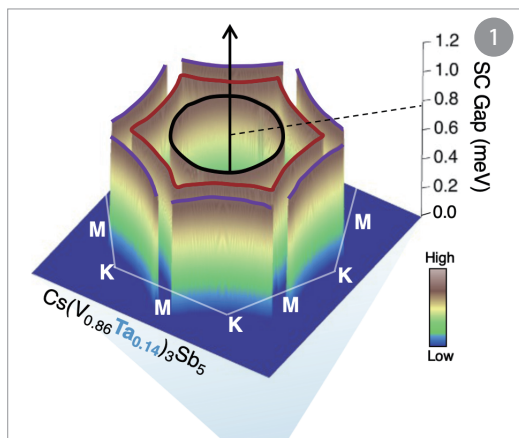
【物性研ニュース】

46 ○東京大学物性研究所人事異動一覧

47 ○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



Nodeless electron pairing in CsV₃Sb₅-derived kagome superconductors

Laser and Synchrotron Research Center, The Institute for Solid States Physics

Yigui Zhong, Kozo Okazaki

Overview

The kagome lattice, consisting of corner-shared triangles (inset of Fig. 1), is an exciting platform for emergent quantum phenomena, since its electronic structure is featured with a flat band, a Dirac cone, and van Hove singularities. Recently, superconductivity that intertwines with charge density wave (CDW) has been observed in kagome metals AV₃Sb₅ (A = K, Rb, Cs) [1-2]. To illuminate the pairing mechanism and the interplays between multiple phases, a fundamental issue is to determine the superconducting (SC) gap symmetry. However, it remains elusive owing to the existence of several conflicting experimental results [2] and lack of a momentum-dependent measurements of SC gap structure. Angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) has been proved to be a powerful tool to directly measure the SC gap in the momentum space [3]. Nevertheless, the relatively low transition temperature (T_c) renders the precise ARPES determination of the gap in the SC state extremely challenging.

In this work, we utilize an ultrahigh-resolution and low-temperature laser-ARPES, together with a chemical substitution of V in CsV₃Sb₅, that raises T_c , to precisely measure the gap structure in the SC state. Considering the accessibility in terms of temperature and possible influence of CDW, we select Cs(V_{0.93}Nb_{0.07})₃Sb₅ and Cs(V_{0.86}Ta_{0.14})₃Sb₅ for the SC gap measurement (denoted as Nb0.07 and Ta0.14, respectively). The Nb0.07 sample exhibits T_c of 4.4 K and a CDW transition at $T_{CDW} = 58$ K, whereas the Ta0.14 sample exhibits a T_c of 5.2 K, but no clear CDW transition (Fig. 1). Our results uncover the SC gap structures of both samples are isotropic, regardless of the disappearance of CDW, hinting at a robust nodeless pairing in CsV₃Sb₅-derived kagome superconductors [4].

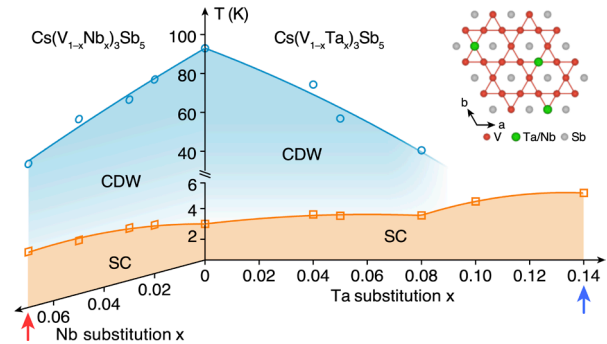


Fig. 1. Phase diagram of substituted CsV₃Sb₅. The inset illustrates Ta or Nb substitutions by V atoms in V-Sb layer.

Results

We first map out the Fermi surface (FS). Fig. 2a shows a joint FS of the Ta0.14 sample by combing three segments, which is consistent with whole-FS mapping using a larger photon energy [4]. Three FS sheets – a circular electron-like pocket (marked as α) and a hexagonal hole-like pocket (marked as β) at Brillouin Zone (BZ) center Γ point, and a triangle pocket (marked as δ) at the BZ corner K point – are well distinguished. This makes the determination of the Fermi momentum (k_F) reliable.

Before investigating the SC gap structure, we confirm the spectral evidence of the superconductivity. Using the Ta0.14 sample as an example, the temperature-dependent EDCs of a cut on β FS are shown in Fig. 2b. Apparently, at $T = 2$ K, far below T_c , the emergent quasiparticle peak around the Fermi level (E_F) clearly indicates the opening of an SC gap. With temperature gradually increasing, the growing intensity at E_F and the approaching peaks suggest that the SC gap becomes smaller and eventually closes. The fitted SC gap amplitudes versus temperature are summarized in the inset of Fig. 2b. The estimated T_c of approximately 5.2 K

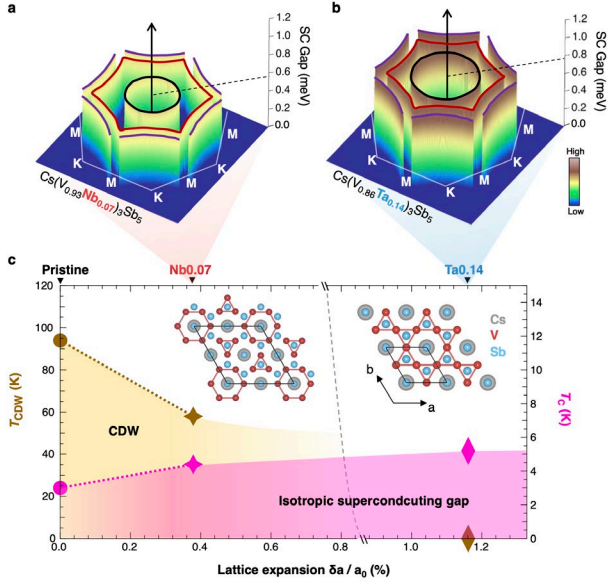


Fig. 3. Robust isotropic SC gap on suppression of CDW. **a,b**, Schematic momentum-dependent SC gap of the Nb_{0.07} and Ta_{0.14} samples, respectively. **c**, Schematic phase diagram as function of the lattice expansion due to substitutions. Here, δa is the change of the in-plane lattice constant relative to pristine CsV₃Sb₅.

$2\Delta/k_B T_c$ seem to be consistent with a conventional *s*-wave pairing. This is also supported by the observed band dispersion kinks stemming from electron-phonon couplings, as well as the positive correlation between the coupling strength and T_c [6]. Precisely, these results do not rule out other nodeless pairing states due to the lack of phase information in ARPES measurements. Particularly, the observation of increased muon spin relaxation rate on CDW-suppressed CsV₃Sb₅ by pressure provide evidence for the potential presence of time-reversal-symmetry-breaking superconductivity [7], highlighting the need for further examination. In addition, a direct ARPES investigation on pristine CsV₃Sb₅ will be more helpful to further pin down the pairing symmetry.

Acknowledgements

This work was supported by the Grants-in-Aid for Scientific Research (KAKENHI) (grant No. JP18K13498, JP19H01818, JP19H00651 and JP21H04439) from the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS), JSPS KAKENHI on Innovative Areas “Quantum Liquid Crystals” (grant No. JP19H05826), the Center of

Innovation Program from the Japan Science and Technology Agency (JST) and MEXT Quantum Leap Flagship Program of Japan (MEXT Q-LEAP) (grant No. JPMXS0118068681).

References

- [1] J. -X. Yin *et al.*, Nature **612**, 647 (2022).
- [2] B. R. Ortiz *et al.*, Phys. Rev. Mater. **3**, 094407 (2019).
- [3] J. A. Sobota *et al.*, Rev. Mod. Phys. **93**, 025006 (2021).
- [4] Y. Zhong *et al.*, Nature **617**, 488 (2023).
- [5] Guguchia Z. *et al.*, Nature Commun. **14**, 153 (2023).
- [6] Y. Zhong *et al.*, Nature Commun. **14**, 1945 (2023).
- [7] R. Gupta *et al.*, Commun. Phys. **5**, 232 (2022).

図 1c、1d に示すように、 1×10^0 サイクルから 1×10^6 サイクルでは、キャパシタが形成された像中央の正方形の領域では顕著な変化がないことがわかります。しかし、 4×10^6 サイクル後では、正方形の左上において、光電子強度が増加した領域が観測されました。この変化は、その場リーク電流測定で観測された SDB の発生と同時に観測されたことから、SDB 時のリーク電流を担う領域 (SDB 領域) を可視化したこと示唆しています。 7.4×10^6 サイクル後には、SDB 領域内において、光電子強度が減少したスポットが観測されました。こちらも、HDB の発生と同時に観測されたことから、電流の伝導パスを可視化したものと考えられます。

それぞれの領域の電子状態を解明するために、PEEM を用いた顕微光電子分光を行いました (図 2)。Area 1 が光電子強度の変化が比較的小さかった領域、Area 2 が SDB 領域、Area 3 は HDB スポットに対応します。Area 1 内の位置 (Pos.1) で解析したエネルギー分布曲線 (EDC) に比べ、Area 2 内の位置 (Pos.2) で解析した EDC は同じ形状で、強度が全体的に大きくなっていることがわかります。

今回の顕微分光では、TiN 電極からの信号と HZO からの信号の足し合わせを観測しています。これらを分離するために、リーク電流の増加に対する電極の電子状態の変化の寄与は無視できると仮定し、Pos.1 の EDC と Pos.2 の EDC の差分を計算しました。その差分 EDC を図 2b の青塗りのスペクトルとして示しています。この差分 EDC から、SDB を担う電子状態は裾構造をしていることがわかります。さらに、同様の解析を Pos.3 に対しても行うと、図 2b の赤塗りのスペクトルに示すように、 -0.1 eV にピーク構造を持つことがわかります。これは、HDB 後の伝導パスを担う電子状態は、裾構造しか持たない SDB 後のリーク電流を担う電子状態とは異なることを示しています。

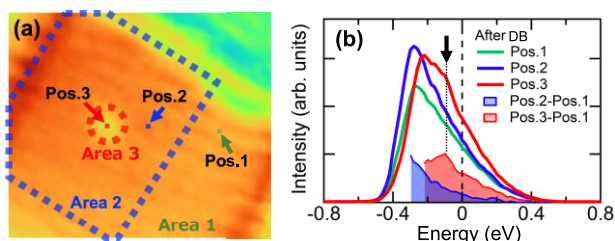


図 2: (a) 顕微光電子分光を行った領域の PEEM 像。(b) 図(a)中の Pos.1、Pos.2、Pos.3 で抽出した光電子エネルギー分布曲線 (EDC)。青塗り、赤塗りの EDC はそれぞれ Pos.2 の EDC から Pos.1 の EDC を、Pos.3 の EDC から Pos.1 の EDC を差し引いた差分 EDC である。

HDB 後には、ジュール熱による誘電体膜のアモルファス化が起こる [9] など、絶縁破壊のトリガーとなった欠陥生成に関する情報が失われる可能性があります。本研究結果でも HDB 後には大きく電子状態が変化していることから、絶縁破壊のトリガーを解明するには、SDB などの HDB の直前の変化を観察することが重要であることが示されました。それと同時に、laser-PEEM による絶縁破壊過程観察は HDB から遡って電子状態の変化を議論できる強力な実験手法であることが示されました。

最後に、HDB 後の PEEM 像を走査型電子顕微鏡 (SEM) 像と比較します。SEM は半導体デバイスの形状検査に広く用いられる非破壊検査ツールです。図 3 に示すように、laser-PEEM では明瞭に可視化された HDB スポットは、SEM では可視化できていないことがわかります。このことから、SEM では可視化できない電極に埋もれた絶縁膜の伝導パスを、laser-PEEM では明瞭に可視化できる強力なツールであることが実証されました。

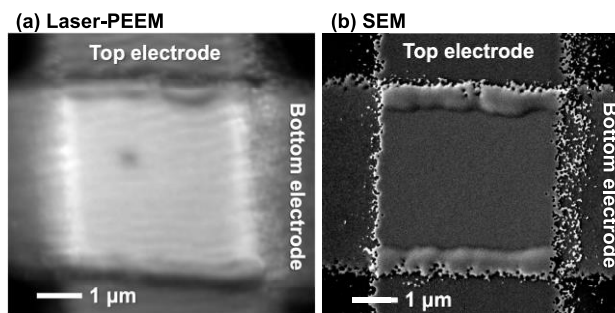


図 3: (a) HDB 後に取得した PEEM 像。(b) 図(a)と同じ試料に対して取得した SEM 像。

[まとめ]

本研究では、laser-PEEM を用いて TiN/HZO/TiN 構造の強誘電体キャパシタの絶縁破壊過程を観察しました。HDB 後の伝導パスを電極越しに可視化できただけでなく、HDB の前駆現象である SDB 領域も可視化することに成功しました。顕微分光から、SDB 領域と HDB スポットの電子状態が異なることを解明しました。SDB 領域と HDB スポットは SEM では可視化できず、laser-PEEM が埋もれた絶縁膜の化学状態の変化を可視化するのに優れた実験手法であることを実証しました。

[謝辞]

本研究成果は、東京大学総長室特別教授室の幸埴特別教授 (元物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター教授、2022 年 6 月に逝去) との共同研究によるものです。

本研究は、JSPS 科学研究費助成事業(研究代表者：藤原弘和、課題番号：23K13363；研究代表者：小林正治、課題番号：21H04549)、一般財団法人材料科学技術振興財団研究助成、精密測定技術振興財団研究助成の支援により実施されました。

[参考文献]

- [1] M. H. Park *et al.*, MRS Commun. **8**, 795 (2018).
- [2] P. Polakowski *et al.*, 2014 IEEE IMW, Taipei, Taiwan, pp. 1-4 (2014).
- [3] H. Kohlstedt *et al.*, Microelectron. Eng. **80**, 296 (2005).
- [4] J. Müller *et al.*, ECS J. Solid State Sci. Technol. **4**, N30 (2015).
- [5] R. M. Tromp *et al.*, Ultramicroscopy **110**, 852 (2010).
- [6] T. Taniuchi *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **86**, 023701 (2015).
- [7] M. P. Seah *et al.*, Surf. Interface Anal. **1**, 2 (1979).
- [8] Y. Okuda *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, SGGB02 (2020).
- [9] K. Shubhakar *et al.*, Microelectron. Reliab. **55**, 1450 (2015).



グラファイトにおける比熱の2重ピーク構造の発見

物性研究所・附属国際超強磁場科学研究施設・小濱 芳允、Zhuo Yang (杨 卓)

黄身が2つある卵は二黄卵と呼ばれる。幸運の兆しだと捉える文化もあるらしく、1つと思っていたことが2つあると人は嬉しいということだろう。本稿では、1つだと思っていたグラファイトの量子振動のピークが、比熱のみ2つに分裂する現象について紹介する(図1c)[1]。この比熱の2重ピーク構造はCEA-GrenobleのChristophe Marcenat博士と著者らにより、2019年頃に始まったグラファイトの共同研究で観測された新現象である(Christophe博士は2024年3月から外国人客員所員として小濱研に滞在)[2]。ピークが1つから2つに増えたものの、我々は科学者であるので単純に喜べなかった。サンプルが双晶になっているのか、測定セットアップの問題か、それとも本質的な現象なのかをさんざん議論したが、比熱の専門家であるChristophe Marcenat博士そして著者も、当時は2つに分裂する比熱ピークの起源を理解できずにいた。そんな折にChristophe Marcenat博士と小濱研の特任研究員であるZhuo Yang博士(現宮田研特任助教)らと共にf電

子系化合物の比熱測定を行ったところ、類似の2重ピークを発見し、同様にf電子系化合物であるCeRu₂Si₂における2重ピーク構造の解釈[3]を思い出した。この青木らによるCeRu₂Si₂論文では、電子状態密度に鋭いピークを1つ有し、これがゼーマンエネルギーによりフェルミエネルギーを横切ると比熱の2重ピーク構造を示すことが論じられている。グラファイトの自由電子も磁場下では量子化されたサイクロトロン運動を示すため、電子状態密度はランダウ準位による複数の鋭いピーク構造を有する。このため磁場下のグラファイトの状態密度はCeRu₂Si₂と類似性があり、サイクロトロンエネルギーでそれぞれのランダウ準位がフェルミエネルギーを横切れば比熱の2重ピーク構造が連続的に現れうる。この解釈で定量的に比熱の2重ピーク構造を再現できたためChristophe Marcenat博士と著者の長きにわたった疑問が解決したわけだが、本稿ではこの詳細について紹介する。

比熱は物性研究に古くから使われる物性量であるが、特に数K以下の低温領域では金属の遍歴電子に関わる電子比熱(C_{el})が支配的となる。電子比熱を温度で割った量(C_{el}/T)は電子状態密度の定量評価に使われており[4]、以下のように表現される。

$$\frac{C_{el}}{T} = k_B^2 \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \left(-x^2 \frac{dF(x)}{dx} \right) dx \quad \text{式1}$$

ここで、 $F(x) = 1/(1 + e^x)$ はフェルミディラック分布関数、 T は温度、 k_B はボルツマン定数、そして $x = E/k_B T$ とおく。式1の近似式として、電子状態密度 $D(E)$ がエネルギー変化しないと仮定すると、非常に良く知られた以下の式が得られる。

$$\frac{C_{el}}{T} = \gamma = \frac{1}{3} \pi k_B^2 D(E_F) \quad \text{式2}$$

ここで、 $D(E_F)$ はフェルミエネルギーにおける電子状態密度を表す定数である。 γ はゾンマーフェルト係数と呼ばれ、式2によるとこの値は状態密度に比例するはずである。こ

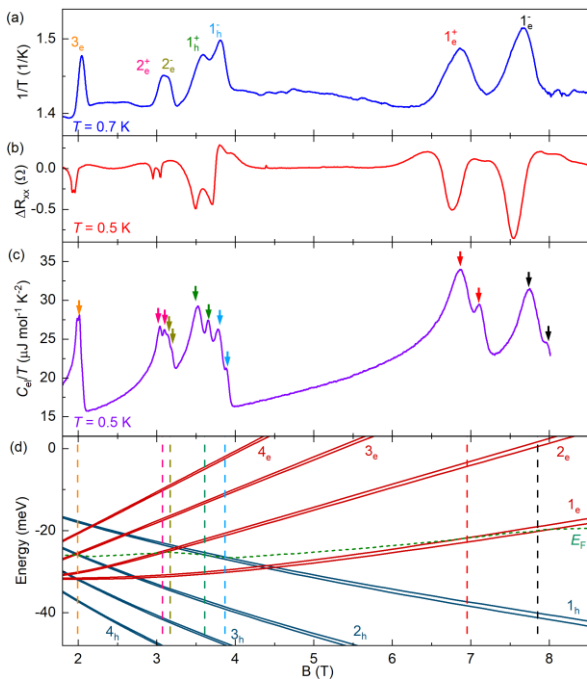


図1: 物性量とランダウ準位の磁場変化。(a)磁気熱量効果($1/T$)、(b)電気抵抗の変化量(ΔR_{xx})、(c)電子比熱/温度(C_{el}/T)、(d)電子のランダウサブバンド(赤線)、ホールのランダウサブバンド(青線)の磁場変化を示す。

微細構造が不明瞭ではない場合も比熱の 2 重ピーク構造は観測されない。しかしながら比熱の 2 重ピーク構造およびその起源となるシャープな電子状態密度は、近藤格子系で一般に存在しうるようで、我々も UCoGe 等で 2 重ピーク構造を観測している[1]。このため図 2(a)のようにシャープな電子状態密度を保持する場合に、どのような C_{el}/T が現れるかを考えるのは興味深い。例えば E_0 がフェルミエネルギーに厳密に等しい場合(この状況は 2 重ピーク構造の中心における磁場で成り立つ)、 C_{el}/T の温度変化は非フェルミ液体の系で見られるような対数発散を示すことが判っている[1]。このような複雑な比熱の振る舞いが、状態密度に特徴的な形状を仮定するだけで出現するのは驚きであった。低温比熱の複雑な振る舞いを説明した論文として、本研究は磁場で誘起されるフェルミオンの諸現象(量子振動、量子臨界現象やリフシツツ転移)のより精密な理解に貢献していくと考えられる。

参考文献

- [1] Z. Yang, B. Fauqué, T. Nomura, T. Shitaokoshi, S. Kim, D. Chowdhury, Z. Pribulová, J. Kačmarčík, A. Pourret, G. Knebel, D. Aoki, T. Klein, D. K. Maude, C. Marcenat, and Y. Kohama, *Nat. Commun.* **14**, 7006 (2023). Editor's Highlighted.
- [2] C. Marcenat, T. Klein, D. LeBoeuf, A. Jaoui, G. Seyfarth, J. Kacmarcik, Y. Kohama, H. Aubin, K. Behnia and B. Fauque, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 106801 (2021). Editors'Suggestion.
- [3] Y. Aoki, T. Matsuda, H. Sugawara, H. Sato, H. Ohkuni, R. Settai, E. Yamamoto, Y. Haga, A. Andreev, V. Sechovsky, L. Havela, H. Ikeda, and K. Miyake, *J. Magn. Magn. Mater.* **177**, 271 (1998).
- [4] C. Kittel & P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics* Vol. 8 (Wiley, 1996).
- [5] K. Miyake and H. Ikeda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 033704 (2006)
- [6] S. C. Riggs, O. Vafek, J. B. Kemper, J. B. Bett, A. Migliori, F. F. Balakirev, W. N. Hardy, R. Liang, D. A. Bonn and G. S. Boebinger, *Nat. Phys.* **7**, 332 (2011).
- [7] V. A. Bondarenko, S. Uji, T. Terashima, C. Terakura, S. Tanaka, S. Maki, J. Yamada, S. Nakatsuji, *Synth. Met.* **120**, 1039, (2001).



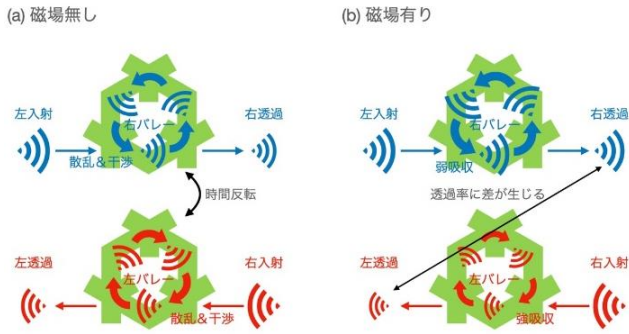


図 2 (a)三角格子に入射した音波はさまざまな方向に散乱されるが、適当に波長を調整することで正三角形の辺方向への散乱波だけが干渉で強め合う状況を作ることができる。この場合左から入射する表面弾性波は右回転する波面を、右から入射する表面弾性波は左回転する波面を作り、それらは時間反転対称性によって全く等価な性質を持つ。(b)磁場をかけると時間反転対称性が破れ、左回転する波面を持つ表面弾性波だけが磁石によって強く吸収される状況を作ることができる。

図 3 に表面弾性波の透過率測定の結果を示す。縦軸は左に透過する表面弾性波の振幅から右に透過する表面弾性波の振幅を引いた量を全透過率で規格化した値である。横軸は外部から印加した磁場の大きさである。磁場がゼロのときはニッケルが磁化していないため左右の回転運動が時間反転対称になっており、その結果、左右透過率の差もゼロとなる。面直磁場をかけるとニッケルが磁化して、時間反転対称性が破れる。三角格子を伝わるバレー表面弾性波はニッケルの磁化と磁気弾性結合によって相互作用するが、右回転の表面弾性波と左回転の表面弾性波では磁化との結合の強さが異なる。例えば基板に垂直に磁化した場合は右回転する表面弾性波が左回転する表面弾性波よりも強く磁化と結合するため、より強くニッケルに吸収される。

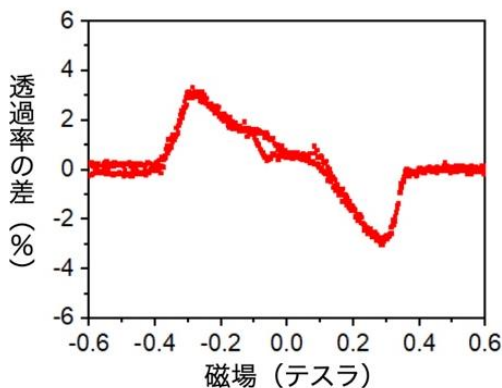


図3 表面弾性波透過率の差の磁場依存性の測定結果
縦軸は適当に規格化された透過率の差で、左右からそれぞれ入射され透過する表面弾性波の振幅が等価でない度合いの指標となる。横軸は外部印加磁場の値で、磁場の符号の正負と左右の回転は対応しているため、透過率の差も磁場の正負によって符号を変える。

このため、左への透過率が右への透過率よりも小さくなる。逆に、磁場の符号を変えるると磁化の方向も反転して左回転の結合が強くなり、透過率の差の符号も反転する。

【まとめと今後の展開】

本研究は、三角格子構造と磁性体の磁場制御を組み合わせることにより、表面弾性波のバレー自由度を選択的に透過させることが可能であること、すなわち、人工的な周期構造を用いることでバレー制御が可能であることを示した。表面弾性波は、電流やスピン波と比べてエネルギー損失が小さく、省エネルギー化に役立つ可能性がある。熱や放射線の影響も受け難く、過酷な環境での使用にも適している。今後さらに工夫された周期構造がデザインされて多種多様なバレー自由度を有する弾性波が実現されれば実用的な技術が発展していくと期待される。

謝辞

本研究は、日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費補助金基盤 S「コヒーレント磁気弾性強結合状態に基づく高効率スピン流生成手法の開拓 (研究代表者：大谷義近)」、LANEF Chair of Excellence, QSPIN project, at University Grenoble Alpes (研究代表者：大谷義近) の支援を受けて行われました。

参考文献

[1] M. Yan, J. Lu, F. Li, W. Deng, X. Huang, J. Ma, and Z. Liu, On-chip valley topological materials for elastic wave manipulation, *Nat. Mater.* **17**, 993 (2018).
 [2] L. Liao, J. Puebla, K. Yamamoto, J. Kim, S. Maekawa, Y. Hwang, Y. Ba, and Y. Otani, Valley-selective phonon-magnon scattering in magnetoelastic superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 176701 (2023).

第1回日本放射光学会高良・佐々木賞を受賞して

附属極限コヒーレント光科学研究センター 教授 原田 慈久

昨年1月7日に、第1回日本放射光学会高良・佐々木賞を受賞する栄誉にあずかりました。受賞の登録が11月となり、すでに1年が経過しての受賞報告となってしまいました。あらためて受賞対象となった研究でお世話になった共同研究者の方々に、この場を借りて深く感謝申し上げます。本賞は35歳未満の若手のための「奨励賞」と、放射光科学の進展に大きく貢献した研究者を対象とした「放射光科学賞」の間で、35歳以上の中堅研究者を対象として、日本の放射光科学を先導してこられた故高良和武氏、故佐々木泰三氏の2名の元放射光学会会長の遺徳を偲んで新設されたものです。

受賞対象となった水の軟X線発光分光の研究は、2022年6月に惜しくも逝去された故辛埴先生がきっかけを与えて下さり、2004年より理研SPring-8で徳島高研究員(当時、現MAX IV研究員)らと水の軟X線発光分光研究に着手しました。液体の水の軟X線発光スペクトルから、水の水素結合は連続的に分布しているのではなく、一つの水分子から見て、正四面体の4つの頂点方向に水分子が配位した、氷に近い局所構造の領域が存在し、それ以外の構造との間に分布の不連続なギャップがあるということを見出して、2008年に論文化しました[1]。案の定、この水の軟X線発光スペクトルの解釈は論争を巻き起こし、過去15年に渡って議論がなされてきました。結局この問題はシミュレーションに委ねられ、最初の実験結果から14年後の2022年、広島大学の高橋修准教授が水の軟X線発光に見られる軌道の分裂の温度依存性、同位体効果を見事に説明するシミュレーション結果を発表し、軟X線発光スペクトルと水素結合構造の関係を明確に示してくれました[2]。

このように、純水のスペクトルの解釈をめぐる論争は非常に長引きましたが、その間に材料界面の水に関する研究が進展しました。材料界面と言っても、軟X線そのものの検出深度は水の中でも数100nmあり、平滑な表面上の水ではなかなか界面近傍のみの変化を捉えることは難しいため、軟X線の検出深度の範囲内に極力多くの界面を含むような系を選びました。1つは、基板上に一定間隔で高分子鎖が並ぶ高分子電解質ブラシです。ブラシはそれぞれの高分子鎖を水で隔てるため、とても高密度で水-高分子界面

が形成されます。一連の研究は九州大学先導物質化学研究所の高原淳教授(現九州大学ネガティブエミッションテクノロジー研究センター教授)に試料提供いただきました。高分子電解質として、PMTACというアンモニウム塩を有するカチオン系高分子と、PMAPSという側鎖末端の実効電荷が中性の双性イオン型高分子で比較すると、PMTACでは水中のアニオンと側鎖アンモニウム基の正電荷の間に強い局所電場が働いて水が構造化するのに対し[3,4]、PMAPSではあたかもバルク環境の水のように振舞うことがわかりました。これらの水素結合の違いが、高分子電解質ブラシの持つ防汚性などの「機能」と良く相関することが示されました。同様に、単位堆積当たりの界面密度が高い系として、東京大学の加藤隆史教授らが開発した、均質かつnmサイズの揃った細孔を持つ自己組織化液晶高分子膜を選びました。細孔に取り込まれる水と透過させるイオンの関係から、イオンを取り巻く水和水の水素結合構造が細孔中で安定に存在できる場合には、水和水をまとったイオンが透過しやすく、水和水の水素結合構造が細孔中と異なる場合には、イオンもろとも透過しないという、これまでとは異なる「イオン選択透過性」のメカニズムが示されました[4,5]。

このように、材料研究者の優れた合成技術、調整能力と放射光の最先端分析を組み合わせることによって、今まで憶測するしかなかった水の姿が顕わになることを実感しました。現在は、企業との共同研究で撥水性、氷結防止、あるいは超微細水やナノバブル水などの「最先端の水」の分析にも挑戦しており、SPring-8での経験をもとに、2024年に稼働する新しい放射光施設NanoTerasuで、エネルギー分解能を改善した軟X線発光分光器を用いて様々な水の分析ができる環境にいます。水をキーワードに集まった人たちと日々議論し、多くの分析手法と放射光の関係性を深く理解する機会を得たことは望外の収穫でした。この賞は関わった多くの諸先輩方と共有したいと思います。

- [1] T. Tokushima *et al.*, Chem. Phys. Lett. **460**, 387 (2008).
- [2] O. Takahashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **128**, 086002 (2022).
- [3] K. Yamazoe *et al.*, Langmuir **33**, 3954 (2017).
- [4] K. Yamazoe *et al.*, Langmuir **38**, 3076 (2022).
- [5] R. Watanabe *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **59**, 23461 (2020).
- [6] K. Hamaguchi *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. **15**, 454 (2024).



2023年1月7日立命館大学びわこ・くさつキャンパスで行われた第37回日本放射光学会年会における授賞式



第 17 回物性科学領域横断研究会 最優秀若手奨励賞を受賞して

物性理論研究部門 押川研究室 修士課程 1 年 福嶋 拓海

この度、第 17 回物性科学領域横断研究会にてポスター発表を行い、最優秀若手奨励賞を受賞いたしました。この賞は、物性物理の将来を担う若手研究者の研究を奨励し、今後の発展研究への動機付けと物性科学の 5~10 年後のさらなる活況に貢献する人材育成の一助とすることを目的とした賞です。数多くの研究の中で、このような栄えある賞を賜り、大変光栄に思います。受賞対象となった研究は「準結晶超伝導体における超伝導電流分布」です。以下で、内容を簡単にご紹介させていただきます。

物質には大きく分けて結晶とアモルファスという固体状態があります。結晶は原子や分子が規則的(周期的)に並んだ構造を持ち、アモルファスは結晶とは正反対のランダムな構造を持ちます。このような構造の違いが物質の性質に大きな影響を与えることはよく知られています。ところが、物質にはもう一つの固体状態があり、それが「準結晶」です。準結晶は結晶とは異なって周期的な構造を持ちませんが、アモルファスとも異なってある種の規則性を持ちます。このような不思議な構造を持つ準結晶が本研究の舞台です。

2018 年に準結晶の合金系でバルクの超伝導が初めて報告されて以来、準結晶の超伝導特性にさらなる注目が集まっています。ここで超伝導とは、ある転移温度以下で電気抵抗がゼロになる現象です。そのような性質を示す状態の物質(超伝導体)に対して磁場を印加すると、Meissner 効果で知られるように物質表面に磁場を遮蔽する電流が現れ、これを一般に超伝導電流と呼びます。先行研究によると、並進対称性(構造の規則性)の欠如に起因する超伝導秩序変数の非一様な空間分布や弱結合領域における有限重心運動量を持つ Cooper 対の存在が指摘されています。しかし、このような超伝導状態の電磁応答と準結晶の幾何学的構造の間の関連性は未解明です。

そこで、私たちは超伝導電流の実空間分布を通して、準結晶超伝導体の磁場に対する応答特性の理解を試みました。具体的には、面内に印加される一様なベクトルポテンシャルの下で、その応答として現れる局所超伝導電流とその常磁性・反磁性成分の実空間分布を解析しました。8 回対称性を持つ Ammann-Beenker (AB) 構造上で引力

Hubbard 模型を導入して、Bogoliubov-de Gennes 方程式の数値計算を行いました。ポスター発表では、始めに AB 構造における局所電流の非一様な実空間分布を示し、これの(1)フィリング、(2)温度、(3)ベクトルポテンシャルの印加角依存性を紹介しました。これらを通して、この構造における電流分布の特徴が常磁性成分に現れることを説明し、さらに、AB 構造で確認された非一様な電流分布が 5 回対称性を持つ Penrose 構造上でも確認できることを解説しました。今回の結果は準結晶超伝導体の特性を理解するための第一歩であり、これらを発展させて準結晶に特有の物性が予言できれば大変興味深いと考えています。

本研究は、竹森那由多特任准教授(大阪大学)、酒井志朗上級研究員(理研)、市岡優典教授(岡山大学)、Anuradha Jagannathan 教授(Université Paris-Saclay)らとの共同研究によるものです。研究のきっかけは、私が岡山大学理学部物理学科に在学時の卒業研究です。思い返すと最初の頃は勉強することが山のようにあり、先生方との議論についていけず、苦しくもどかしい思いもしました。また、恥ずかしながら私のマイペースな性格のために、おそらく先生方の思うような結果を出せない時もあったと思います。それでも粘り強く指導していただいたおかげで、このように一つの成果をあげられたと思います。また、この経験がきっかけとなり、物性研究に興味を持つことができました。この場を借りて深く感謝を申し上げます。今後はさらに研究に励み、押川研究室でのテーマも同様に発展させていきたいと思っています。

参考文献

- [1] T. Fukushima, N. Takemori, S. Sakai, M. Ichioka, and A. Jagannathan, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2461**, 012014 (2023).
- [2] T. Fukushima, N. Takemori, S. Sakai, M. Ichioka, and A. Jagannathan, *Phys. Rev. Res.* **5**, 043164 (2023).



日本膜学会「第45年会」・「膜シンポジウム2023」 合同大会学生賞を受賞して

軌道放射物性研究施設 原田研究室 博士後期課程2年 富依 勇佑

2023年11月20日～22日に早稲田大学リサーチイノベーションセンターにて行われた日本膜学会「第45年会」・「膜シンポジウム2023」合同大会^[1]において、学生賞を受賞いたしました。この賞は、同大会にて行われた約70演題の発表の中から、厳正な審査を経て、特に秀でた研究およびプレゼンテーションを行った者に授与されます。このような栄誉に恵まれたこと、大変光栄に存じます。

受賞対象となった発表は「軟X線発光分析を用いた疎水性単分子膜界面における撥水挙動解析」です。以下に研究内容を簡潔にご紹介いたします。

本研究では、多様な機能を付与できるナノ構造材料である自己組織化単分子膜の膜界面における水の吸着挙動に関して知見を得るべく、元素ごとに占有軌道の電子状態を観測できる強力なツールである軟X線発光分光 (XES) を用い、界面での疎水性が異なる多様な単分子膜上での水の電子状態を解析しました。一般に真空中での測定を要するXESですが、我々の研究グループが開発した、気体・液体雰囲気下においてもXES測定を可能とするセットアップ(**Fig. 1**)^[2]を用いることで、機能発現時における水の電子状態解析から、分子レベルで水の吸着メカニズムに関する知見を得ることに成功しました。発表では、ハイドロカーボン鎖とフルオロカーボン鎖の比較を通じて、鎖への水の取り込みにおける顕著な違いを、XESより得られた水の水素結合構造より明らかにしました。さらにこの実験的に観測した吸着事象の差異を分子動力学シミュレーションにより可視化することで、分子鎖が水の段階的な吸着に対して与える影響について詳細に考察しました。

本成果は、広範な分野で利用されている機能性材料の分子設計に新たな視点を提供し、その開発に大いに貢献することが期待されます。

最後になりますが、本発表を行うにあたり、日頃よりご指導頂いている原田慈久教授、木内久雄助教をはじめ、共に切磋琢磨している研究室の皆様やお世話になった多くの方々にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。この度の受賞をより一層の研究への奮起として活かしたいと思います。

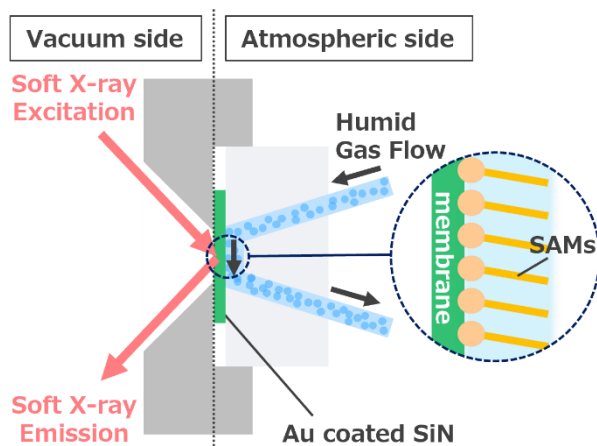


Fig. 1. Schematic of experimental setup for XES measurements and magnified view of the substrate surface.

参考文献

- [1] 一般社団法人 日本膜学会 公式ページ
<https://www.maku-jp.org/>
- [2] Yamazoe, K. *et al.*, *Langmuir*, **2017**, *33*, 3954–3959.



第 18 回日本物理学会若手奨励賞を受賞して

附属極限コヒーレント光科学研究センター 板谷研究室助教 栗原 貴之

この度、第 18 回日本物理学会若手奨励賞(領域 5: 光物性)を受賞する栄誉に与りました。受賞となった研究対象は「テラヘルツ・中赤外における非線形マグノンクスと分光手法の開拓」です。この一連の研究は、私が博士課程時代に在籍した物性研の旧末元徹研究室から開始して、ドイツのコンスタンツ大学におけるポストドク時代から現在に通じて行ってきたものです。この間様々な方々のご協力を頂きましたことを、この場を借りて感謝申し上げます。

私はフェムト秒からピコ秒といった超高速時間スケールにおける磁性体のスピンドYNAMIXSに関して研究を行っています。反強磁性体などでは強い交換相互作用によって自然共鳴周波数が THz に達することが知られ、従来のスピントロニクスデバイスを数桁高速化できる可能性から注目を集めています。このような速いダイナミクスを測るには電気的な分解能では追いつけないため、超短パルスレーザーが必要になります。通常の超高速実験の研究室では可視から近赤外のフェムト秒レーザーが比較的簡便に得られるため、これを使ったポンププローブ分光は従来数多く行われてきました。これに対し、2010 年代前後から発達してきた高強度 THz 波や中赤外光などの光子エネルギーの低い赤外パルスを用いると、余剰エネルギーが生じないためスピン系を非熱的に励起でき、コヒーレントなマグノンをピコ秒スケールで精密に制御できることが知られてきました。末元徹研究室は当時このことを世界に先駆けて示したグループの一つであり、私は物性研合成室のフローティングゾーン炉を用いて合成した高品質のオルソフェライト単結晶(RFeO_3 , R=希土類または Y)をターゲットとして、こうした赤外パルス光源を用いたスピン系の超高速分光・制御手法を開発してきました[1-7]。

一つ目の論文は、超高速磁気相転移の過程において対称性の破れを決めるものは何か? という問いに対して取り組んだものです[1]。ErFeO₃ はスピン再配列相転移という 2 次の相転移を持ち、85 – 96 K 付近で弱強磁性の配列方向が連続的に 90 度回転します。この過程は常温温度だけでなく可視光による瞬時加熱でも生じさせることができますが、ゼロ磁場下で実験を行うと相転移後の磁化状態は

上向き・下向きの両状態が混ざり合い、正味の磁化はゼロとなるのが普通です。しかしここで光照射の前に、金属プラズモン構造を使って増強した高強度の THz 波[2]でマグノンを励起しておいてやると瞬間的に磁化が傾くため、ここにタイミングよく光パルスを照射することで相転移の方向性が決定的に定まり、終状態では飽和磁化の 80% に近い巨大な磁化を生成できることがわかりました。この結果は THz 波を用いたスピンスイッチングの最初期の実現例の一つとなりました。

二つ目の論文は、光誘起の後にスピン再配列相転移が生じるまでの微視的な機構をより詳しく調べたものです[3]。一般的に考えられてきた機構は、光照射を行うとまず電子系から格子系へエネルギーが緩和し、それに伴って 4f 系の電子状態が熱化することで 3d-4f 交換結合により磁気異方性が徐々に変化していく、というものでした[4]。しかし、近赤外光を使った励起ではそれぞれの過程を分離することが難しく、緩和の各過程がどの程度の時間スケールで生じるのかは不明な部分が多い状況でした。これを明らかにするために、高強度のフェムト秒中赤外光源を用いて 4f 電子系の内部遷移を共鳴的に励起するという実験を行ないました。比較のために行ったフォノン励起の場合は光励起後数 ps 経ってから再配列相転移が生じ始めるのに対し、4f 共鳴励起では瞬間的に磁気異方性が変化し、励起直後から相転移が始まることがわかりました。このことから、従来見られていたデッドタイムは確かに格子系の加熱に対応する時間スケールであること、また fs の中赤外共鳴励起によってこれを回避し高速な相転移を引き起こすことが可能であることがわかりました。

三つ目の論文では、高強度 THz 波によって誘起された非線形なスピンドYNAMIXSの観測方法に関する研究を行いました[5]。通常スピンドYNAMIXSの光学応答は誘電率の非対角項にあたる磁気光学効果(ファラデー効果など)をプローブとして観測されることが多いですが、ここでは磁気複屈折効果という誘電率の対角項の変化を用いてプローブすることにより、スピンドYNAMIXSの 2 次高調波成分が感度良く観測できることを発見しました。詳細な理論

解析を行うと、このような非線形応答は異なるマグノン間の非調和な結合に起因している可能性が示唆されます。その様子は後に共同研究者である MIT のグループによる 2 次元分光実験で明瞭に観察されました[6]。

テラヘルツ波による超高速スピン制御、いわゆるテラヘルツマグノンクスに関わり始めてから 10 年近くになりますが、本研究を通じて実に多くの方々と知り合う機会に恵まれたことを何よりも有難く思います。物性研所内の様々な部門・研究室をはじめ、リーディング大学院の海外派遣プログラムでインターンを行った MIT の Keith Nelson 研、ポストク先であり興味本位の挑戦的な研究にも関わらず大変な協力をしてくださった Konstanz 大の Alfred Leitenstorfer 研など、今でも現在進行形で共同研究を続けさせていただける国内外のネットワークを構築できたのは得難い経験でした。今後も超高速物性を明らかにするための光源・計測技術開発を通じて、物性コミュニティの発展に寄与できるよう研究を続けていきたいと思えます。

- [1] T. Kurihara, et al., Phys. Rev. Lett. 120, 107202 (2018).
- [2] T. Kurihara, et al., Phys. Rev. B 90, 144408 (2014).
- [3] G. Fitzky, et al., Phys. Rev. Lett. 127, 107401 (2021).
- [4] K. Yamaguchi, et al., Phys. Rev. B 92, 064404 (2015).
- [5] T. Kurihara, et al., Commun Phys 6, 51, 1–6 (2023).
- [6] Z. Zhang, et al., Nat. Phys. (31 January 2024).
- [7] M. Weiss et al., Nat. Commun. 14, 7651 (2023).



を取り込んで強磁場にも適用できる公式ができたと確信した瞬間でした。

古典的によく知られている式でも、ひとたび量子の世界に入るとそれを再現するには想像以上に手間がかかる場合があります。しかし改めて量子論に基づいた視点で眺めてみると、自明としか思えなかった式が全く異なる解釈を持つことがあると分かります。ホール伝導度における散逸伝導から非散逸伝導へのクロスオーバーはその一例で、電流を非平衡流と平衡流に分けることにより磁場下での二者の移り変わりが明確になり、2次元系の量子ホール効果との関係も見えてきます。古典的な公式の中には、あえて量子論から再発明することで新しい発見が生まれるようなものが隠れているのかもしれません。

私は物性理論を始めてからまだ日が浅いのですが、特に量子輸送論を扱って感じることは、作業のほとんどが数学的な操作の繰り返しであって、中々物理にはたどり着けないということです。しかし最後まで計算(特に解析計算)をやりきることができれば、突如として物理が顔を出し、各項が現象の起源を語り始めます。このような目の覚めるような喜びを目指して日々計算を進めています。

「Outstanding referee」を受賞することになった査読では、電気通信大学の伏屋雄紀先生の研究室で培った知見が大いに役立ちました。「若手優秀発表賞」を受けた研究内容も同研究室での議論に端を発しており、博士課程は大変実りのある3年間だったと思います。また、物性研強磁場の徳永将史先生のご厚意により、強磁場コミュニティとのつながりを持たせていただいたことも発表賞の受賞につながりました。両先生に改めて御礼申し上げます。加えて東大強磁場を中心とした学術変革領域研究「1000 テスラ超強磁場による化学的カタストロフィー：非摂動磁場による化学結合の科学」に研究員として採用していただいた事で、学内外の幅広い研究に触れる機会ができました、代表の松田康弘先生に御礼申し上げます。

(参考文献)

- [1] A. Yamada and Y. Fuseya, arXiv:2307.00763 (2023).
- [2] A. Yamada and Y. Fuseya, Phys. Rev. B 103, 125148 (2021).
- [3] A. A. Abrikosov, Sov. Phys. JETP 29, 746 (1969).



物性研に着任して

物性理論研究部門 川畑 幸平

2013年に東京大学に学生として入ってから10年経って、教員として東京大学に勤めることになった。生まれ育った関西を離れて初めて駒場キャンパスにきた10年前の気持ちと、東京での9年間の学生生活およびプリンストンでの1年間のポストドク生活を経て柏キャンパスにきた今の気持ちは、もちろん大きく異なる。

駒場には理科3類で入学し、当初は医学部に進むつもりだった。中高生のころには国際物理オリンピックに参加するなど、大学以降の物理もすすんで勉強していたが、物理がふつう対象とする自然現象よりも、人間に関わる営みにそもそも興味があり、脳科学や神経科学を専攻しようとした。しかし、しばらく医学部の研究室に通って顕微鏡に向かっていると、医学研究に適性がなく、人間であるとはどういうことかといった理論にむしろ関心があることに気づく。関心の内容から自然なように、同時期に人文科学をよく学ぶようになった。文字通り生をかけて自分の感覚に内側から向き合い、特異であるがそれゆえに普遍性を帯びるような哲学や文学を学んだ。世界にはこんなひとが生きていたのかと驚き、その底知れなさを感じるとともに、ずっと抱いていた閉塞感が解消され、希望がもてた。

人文科学と自然科学では、どちらがより遠くに行けるのだろうと考え、その選択に悩み続けたとき、自分の目の前には何人かの自由な先生がいた。目が覚めるような鋭いテキスト解釈を示す哲学の先生、生命科学で博士号を取りながらも美術史に転向した先生、「つまらない医者だけにはなっちゃだめだよ」と言った医学の先生。自分自身の問いに妥協せず向き合うその姿は輝いて見えて、つまるところ、自分は学問そのものに関心があるのだと自覚した。学問をすることをつうじて、世界に新しいものの見方の地平を与えられるようなことがしたかった。それに気づいたとき、どの分野を専攻するかはそれほど重要ではなくなっていたが、特異な思想を展開した過去の哲学者がもし今を生きていたとしたら、物理を専攻するのではないかというようなことを思った。将来的に哲学や文学を専攻することになっても、まず物理を学んだほうがいいようにも直観した。

そうして理学部物理学科に進学して、大学院では物性理論を専攻した。物理の理論研究に適性があるかどうかを判

定することが目的で、適性がないとわかったらその後は人文科学の大学院に入り直そうと思っていた。その判定のための大学院5年間で最初から考えていたこともあって、物理の研究にはできるかぎり努力した。しかし、心性としては人間的な営みに惹かれていたこともあって、自分が物理を専攻していることに、つねに引け目があった。5年間の期限が近づいてきた博士課程の半ば、新型コロナウイルスが世界を直撃したころ、自分にとって何が重要か、再び悩んだ。そうして自身のこれまでの研究を見返したとき、歴史のなかで残ってきた概念と比較するともちろん些細なものであっても、それでもたしかにあたらしい概念が提示されているように思った。究極的には、自分が物理に感じてきた魅力は、現象自体は自然のなかでただ生成生起しているはずなのに、自然に内在するわけではないフィクショナルな概念を人間が生み出して、ひとまとまりの論理的な物語が作られることにあった。その意味で、小説を読んだり映画を観たりするなかで得られる感動と、自分のなかでは同じ感覚だった。自分の研究がそういったあたらしい概念をすこしは与えられていると思ったとき、こういう物理学者が世界にいてもいいだろうと、自分自身の存在を肯定できるようになった。

大学院を卒業してからは、プリンストンでポストドクとして勤めた。幼いころから欧米の大学にあこがれていたものの、ずっと留学する機会がなく、その最後の機会ではないかと思っていた。期待と不安をもって臨んだプリンストンでは、多くのひとにめぐまれて、自分の研究は好意的に受け入れられた。国際的な研究環境との接続を維持し、同時に自分が重要だと考える問いに向き合い続けることさえできれば、どこにいても研究を続けられるだろうと思うことができた。

医学部に進むかどうか迷いながら、駒場の教室で哲学や美術の授業を受けていたころからずいぶん遠くまで来てしまったような気がする。そのころいやだったのは、自分の生に関わるような人間的なこととまともにぶつかることを恐れて、それを避けるようにして自然科学に専念することだった。それに無自覚でいることもいやだった。自分もこれからそういう研究者になっていくか、はたしてどうか。

物性研究所短期研究会

「熱電材料の高性能化はどこまで行くか」開催報告

附属物質設計評価施設 岡本 佳比古

形式：東京大学 物性研究所 大講義室における対面方式

日時：2023年12月5日10時～12月6日16時45分

提案者：森 孝雄（物質・材料研究機構）、岩佐 義宏（東京大学）、小形 正男（東京大学）、常行 真司（東京大学）、寺崎 一郎（名古屋大学）、福山 秀敏（東京理科大学）、山本 貴弘（東京理科大学）、岡本 佳比古（東京大学）、中辻 知（東京大学）、森 初果（東京大学）

熱電変換は固体中の伝導電子による電気エネルギーと熱エネルギーの直接変換です。現在、ペルチェ冷却と呼ばれる固体素子を用いた冷却・温度制御技術として広く実用されていますが、一方でゼーベック効果により熱エネルギーから電気エネルギーを取り出すこともできるため、廃熱発電の省エネ効果や無数のセンサーの自立電源としても期待されています。熱電変換をより広範な用途で実用するためには、素子を構成する熱電変換材料がより高い性能を示す必要があります。この性能は、ゼーベック係数 S 、電気伝導率 σ 、熱伝導率 κ 、動作温度 T を組み合わせた無次元性能指数 $ZT = S^2\sigma T/\kappa$ で表されますが、これらの物理パラメータにはトレードオフの関係があり、高性能化は容易ではありません。しかし近年、さまざまな高性能化の戦略により高い ZT が実現しており、従来は $ZT \sim 1$ が高性能材料の一つのベンチマークとされていましたが、最近では $ZT > 2$ に達する高性能材料の報告が増えています。また、巨大な出力因子 $S^2\sigma$ を示す物質系も発見されてきています。理論的側面に関しても近年進捗があり、従来は現象学的な半古典的なボルツマン理論が用いられてきましたが、ここ数年、熱電現象を量子力学的に取り扱う熱電線形応答理論が開発され、従来の予測を超えた新規な熱電特性の発見への道筋が切り拓かれ始めています。さらに、トポロジカル材料、カーボンナノチューブ、有機材料といった、これまでの材料開発の主戦場とは異なる新規材料系においても高い熱電性能を示すさまざまな新材料系が見出されています。

このように、熱電変換材料の開発は実験的にも理論的にも大きな進展がみられる状況にあります。そこで、熱電変換材料に関する集中的な議論を通じて新たな展望を切り拓くことを目的とした短期研究会を、2023年12月5日と6日に、物性研究所大講義室を会場とする対面方式によって開催しました。研究会がカバーすべき材料系は、従来材料である無機系のナローギャップ半導体から有機物、低次元

系、薄膜など、多岐にわたります。また、新材料開発の物理的なアプローチについても、フォノンの制御やゼーベック係数の増大といった方法だけでなく、トポロジカル物性や磁性との相関などさまざまです。本研究会では、各招待講演者の持ち時間を質疑込みで20分と短めに設定したうえで、研究会の最後に総合討論の時間を設けました。それにより、熱電研究の多彩なアプローチを俯瞰的に見渡しながら、今後、大きな性能向上に繋がりを重要なポイントを集中的に議論し、その結果得られた知見を各参加者が共有することを目指しました。研究会の使用言語は英語を基本とし、各招待講演の講演と質疑応答は英語で行われました。

研究会には110名を超える多くの方の参加登録があり、会場となった大講義室において活発な議論が行われました。特に、民間企業に所属される方にも多く参加いただき、熱電研究の裾野の広さ、社会への繋がりの強さを改めて感じました。研究会では、冒頭に提案代表者の森孝雄先生と廣井所長のご挨拶があった後、森孝雄先生と小形正男先生による、それぞれ実験、理論の立場から熱電研究の現状を俯瞰する招待講演から始まりました。初日の最後には福山秀敏先生による基調講演が行われました。「熱流とは何か」という熱電変換にとって核心的でありながら難しい問いかけに始まり、いかにして“Beyond Mott”を目指すかについて、さまざまなアプローチが議論されました。「基礎と応用の区別はない」という久保亮五先生のお言葉の引用もあり、熱電研究が物性研究者にとって挑戦的かつ魅力的な研究対象であることを再認識できました。2日目も、パナソニック株式会社 菅野勉 主席研究員による Mg_3Bi_2 系の欠陥の化学とフォノンの性質に関する招待講演を皮切りに、午後のポスターセッションも含め、活発な議論が行われました。最後に、山本貴弘先生を座長として総合討論が行われ、多岐にわたる講演が振り返られるとともに、フォノンの問題を中心に討論が行われました。特に、実

験的に観測された特異なフォノンの散乱現象におけるディ
スオーダーやグレインの役割や、ソフト化、相転移の効果
などが議論されました。個人的には、理論サイドではゼー
ベック係数と電気伝導率からなる出力因子の解釈には道筋
が見えているものの、特に *dirty* な系の熱伝導率の解釈が
大きな問題と感じられている一方で、実験サイドでは、熱
伝導率の低減に関しては理屈は抜きにしても有効な処方箋
が揃いつつあるため、出力因子をいかに実験的に向上させ
るかが重要という意見を、興味深く感じました。最後の

まとめで森孝雄先生が話されたように、本研究会は物理
ベースで熱電変換を議論する国内の研究会としては大部分
の主要研究グループに参加いただけた、またとない機会と
なったと思われ、今後、このような研究会を継続して行う
など、熱電研究グループの高いポテンシャルを生かせるよ
うに取り組んでいかねばならないと感じました。このよう
な有意義な短期研究会を無事に開催できたことを、全ての
参加者の皆様と、研究会の運営に携わった全ての方に感謝
申し上げます。

プログラム

Dec. 5th

10:00-10:05 Welcome Address (Takao Mori, Chairperson)

10:05-10:10 Greetings (Zenji Hiroi, ISSP Director)

Session 1 Chair: Yoshihiko Okamoto (The University of Tokyo)

10:10-10:30 Takao Mori (National Institute for Materials Science)

“Development of enhanced thermoelectric materials and viable devices”

10:30-10:50 Masao Ogata (The University of Tokyo)

“Recent Development of Electrothermal Transport Properties in Microscopic Theory”

10:50-11:10 Kazuhiro Yanagi (Tokyo Metropolitan University)

“Thermoelectric properties of single-walled carbon nanotubes”

11:10-11:30 Takehiko Mori (Tokyo Institute of Technology)

“Temperature Dependence of Field-Effect Thermoelectric Power in Rubrene Crystals”

11:30-11:50 Takahiro Yamamoto (Tokyo University of Science)

“Kubo-Luttinger linear response theory of thermoelectric transport in disordered systems”

11:50-12:50 Lunch

Session 2 Chair: Satoru Nakatsuji (The University of Tokyo)

12:50-13:10 Yoshiaki Nakamura (Osaka University)

“Methodology of thermoelectric performance enhancement in low dimensional Group IV element materials”

13:10-13:30 Jun Hayakawa (Hitachi, Ltd)

“High power and environmentally friendly Si-based themoelectric materials”

13:30-13:50 Manaho Matsubara (Tokyo University of Science)

“Theoretical analysis of thermoelectric effect in FeSe thin films based on two-band model”

13:50-14:10 Akitoshi Nakano (Nagoya University)

“Thermoelectric property of uncompensated semimetal Ta₂PdSe₆”

14:10-14:30 Yoshihiko Okamoto (The University of Tokyo)

“Electronic states of a one-dimensional van der Waals crystal Ta₄SiTe₄”

- 14:30-14:50 Yoshihiro Iwasa (The University of Tokyo)
 “Two dimensional materials”
- Session 3 Chair: Hatsumi Mori (The University of Tokyo)
- 15:10-15:30 Satoru Nakatsuji (The University of Tokyo)
 “Large Magnetothermoelectric Effects of Topological Magnets and Their Applications”
- 15:30-15:50 Masaki Mizuguchi (Nagoya University)
 “Thermoelectric power generation by magnetic nano-structures”
- 15:50-16:10 Kenichi Uchida (National Institute for Materials Science)
 “Hybrid Transverse Magneto-Thermoelectric Cooling in Artificially Tilted Multilayers”
- 16:10-16:30 Akio Kimura (Hiroshima University)
 “Elucidating the ‘actual’ spin-resolved band structure of magnetic thin films for enhanced thermoelectric generations”
- 16:30-16:50 Taishi Takenobu (Nagoya University)
 “Unsolved problem in organic polymer materials”
- 16:50-17:10 Junichi Takeya (The University of Tokyo)
 “Thermo-electric properties of doped organic crystalline semiconductors”
- Keynote Talk Chair: Masao Ogata (The University of Tokyo)
- 17:30-18:00 Hidetoshi Fukuyama (Tokyo University of Science)
 “Search for good thermoelectrics based on Kubo-Luttinger theory”

Dec. 6th

- Session 4 Chair: Ichiro Terasaki (Nagoya University)
- 10:00-10:20 Tsutomu Kanno (Panasonic Holdings Corporation)
 “Defect chemistry and phonon damping in high-efficiency n-type Mg_3Sb_2 -based thermoelectric materials”
- 10:20-10:40 Tsunehiro Takeuchi (Toyota Technological Institute)
 “Development of high-performance thermoelectric materials using constructive electronic structure modifications and composite effects”
- 10:40-11:00 Chul-Ho Lee (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)
 “Development of thermoelectric materials with low thermal conductivity”
- 11:00-11:20 Naohito Tsujii (National Institute for Materials Science)
 “Development of Thermoelectric Materials using Magnetic Interaction”
- 11:20-11:40 Kaoru Toko (University of Tsukuba)
 “Thermoelectric properties of low-temperature polycrystalline group IV semiconductor thin films”
- 11:40-12:00 Kazuhiko Kuroki (Osaka University)
 “Theoretical studies on the thermoelectric properties of $CaAl_2Si_2$ -type Zintl phase compounds”
- 12:00-13:00 Lunch



13:00-13:45 Poster Session

Session 5 Chair: Takao Mori (National Institute for Materials Science)

13:45-14:05 Ichiro Terasaki (Nagoya University)

“Scattering time: the last black box”

14:05-14:25 Hideaki Maebashi (The University of Tokyo)

“Lorenz Ratio in Strongly Correlated Electron Systems: Effects of Umklapp Scattering”

14:25-14:45 Jun Fujioka (University of Tsukuba)

“Thermoelectric oxide narrow-gap semiconductor: electron-doped Pd-oxide”

14:45-15:00 Masayuki Ochi (Osaka University)

“Electron-hole dichotomy and enhancement of thermoelectric power factor by electron-hole-asymmetric relaxation time: a model study on a two-valley system with strong intervalley scattering”

15:00-15:15 Yoshiki Sato (The University of Tokyo)

“Orthogonal thermoelectricity in a multi-dimensional goniopolar conductor LaPt_2B ”

Session 6 Chair: Takahiro Yamamoto (Tokyo University of Science)

15:35-16:35 General Discussion

16:35-16:45 Closing

研究会当日の会場の様子



ISSP ワークショップ

「表面界面スペクトロスコピー2023」

日 程：2023年12月20日(水)～12月21日(木)

場 所：物性研究所本館6階講義室およびラウンジ（対面形式）

提案者：尾崎泰助、杉野修、長谷川幸雄、松田巖、吉信淳

URL：https://yoshinobu.issp.u-tokyo.ac.jp/ISSPWS_SIS2023.html

本ワークショップは、2023年12月20日(水)～12月21日(木)に、東京大学物性研究所および表面界面スペクトロスコピー研究会の共催のもと、物性研究所本館6階講義室およびラウンジにおいて対面形式で行われた。事前の参加登録者数は128名であったが、実際の参加者数は、12/20は110名、12/21は81名であった。

表面・界面は、近年注目されているトポロジカル物質の表面状態など学問的な観点からだけでなく、物質変換・エネルギー変換の舞台であるがために、地球環境・エネルギー・情報分野における課題解決につながる触媒・太陽電池・燃料電池・二次電池・各種デバイスなど応用面でも重要性が増している。最近の実験手法および第一原理計算の進歩により、理想的なモデル表面だけでなく、複雑な表面系への展開や、実際の材料における動作環境下での表面界面を局所的にオペランド観測することが可能になってきた。また、表面界面では細部に物性や機能発現の本質が存在することが多く、それらを原子・分子スケールで観測し理解することができるようになってきた。

本ISSPワークショップでは、表面振動分光、局所プローブ顕微/分光、表面非線形分光、光電子分光、放射光分光など、表面・界面に敏感で選択的な分光実験や理論研究を中心とした最新の研究成果の講演およびポスター発表を通じて、多様なバックグラウンドを持つ研究者が討論を通して相互に理解し、新たな共同研究が生まれることを目的として開催された。

招待講演は以下の5件である。

- チュートリアル招待講演：松永隆祐（東大・物性研）
「テラヘルツ分光の基礎と固体の高速ダイナミクス研究」
- チュートリアル招待講演：井手上敏也（東大・物性研）
「対称性制御によるファンデルワールス結晶界面の物性開拓」
- 招待講演：稲垣 泰一（慶応大・理工）「低波数ラマン分光シミュレーションによる界面水の分子間振動と緩和ダイナミクス」
- 招待講演：熊谷崇（分子研）「探針増強ラマン分光による

原子・分子スケールの構造とダイナミクスの探索」

- 招待講演：長谷川修司（東大・理）「量子物質表面の構造・電子状態・電子輸送」

さらに、一般口頭講演8件、学生賞応募口頭講演8件、ポスター講演47件が発表された。表面界面における超高速分光、デザインされた電極触媒や単一原子合金触媒の反応、局所プローブ顕微鏡/分光による単一原子・分子の物性や反応、最先端の第一原理計算による表面動的過程や振動ダイナミクスの計算、金属ナノ粒子の近接場と分子の相互作用、探針増強効果を使ったラマン分光や和周波発生分光、低次元物質の電子物性や反応などを含め、表面界面における最先端の研究成果が発表され、たいへん活発な議論が行われた。ワークショップ後の参加者からの声によると、若い参加者を中心とした多様な内容と久しぶりの対面による熱い議論が好評であった。

プログラムの詳細と講演要旨集は、以下の Web サイトよりダウンロードすることができる。

https://yoshinobu.issp.u-tokyo.ac.jp/ISSPWS_SIS2023.html



学生賞は厳正な審査（講演要旨による口頭発表選別と、発表内容・質疑応答の評価）の結果、下記の2名に授与された。

- Zhipeng WANG（東北大学・多元研）「Unveiling spin configurations of Kondo molecular magnet on superconductor surface with sub-molecular resolution」
- 片岡佑太（東京大学・物性研）「機械学習ポテンシャルによる金属表面水素拡散の経路積分分子動力学計算」

なお、今回のワークショップの世話人として、所外から荒船竜一（物材機構）、奥山弘（京大）、金有洙（理研、東大）、

ISSP ワークショップ

ISSP Women's Week 2023

[期 間] ISSP Women's Week : 2023 年 11 月 25 日(土)~2023 年 12 月 1 日(金)

[提案者] [代表] 松田巖、井手上敏也、大谷義近、岡隆史、岡崎浩三、押川正毅、徳永将史、中島多朗、藤野智子、堀尾真史、山浦淳一、Lippmaa Mikk
(所属は全員が東京大学物性研究所)

[主 催] 東京大学物性研究所

[協 賛] 日本学術振興会 学術変革領域研究(A)「1000 テスラ超強磁場による化学的カタストロフィー：非摂動磁場による化学結合の科学」

[ご支援] 本年度の企画はキオクシアホールディングス㈱の理系女性活躍推進活動にご支援いただきました。

§1 本年度の ISSP Women's Week について

我々の生活環境は変化し続け、家庭や職場においても多様化が進み、今後は我々一人一人が満足する生き方と働き方が実現できる社会が必要となってきました。その中で、科学技術の発展を志す若い世代に対しては適時適切に彼らを迎える教育・研究の機会を示し、「旬な」ロールモデルを紹介し、そして彼らの「声」を聴く対話の場を設けることが大切です。一方で物性科学の分野ではこれまで女子学生・女性研究者の割合が低かったという経緯がありました。そこで研究活動における女性比率向上を中心的な取り組みとして、東京大学物性研究所では学生(中学生、高校生、大学生、大学院生)と若手研究者を対象に、「やっぱり物理が好き！」*1「ISSP Women's week」*2「未来をのぞこう！」*3の3つの事業に取り組んできました。

ISSP Women's Week は 2021 年度より実施しています。今年度は 2023 年 11 月 25 日(土)~2023 年 12 月 1 日(金)の 1 週間を開催期間としました。§2 に示すように様々なセミナーや研究会などのイベントを実施し、のべ306名の参加者がございました。また今回の企画はキオクシアホールディングス㈱の理系女性活躍推進活動にご支援いただき、また協賛として日本学術振興会 学術変革領域研究(A)「1000 テスラ超強磁場による化学的カタストロフィー：非摂動磁場による化学結合の科学」からもご援助いただきました。

ISSP Women's Week 2023 では初日に女子学部生及び女子大学院生を対象としたイベント「やっぱり物理が好き！」を実施し、その後、FD・SD 研修や女性研究者を講師とした部門・施設セミナーを行いました。そして最後の2日間を使って§3 の研究交流会を催しました。研究交流会では様々な分野で活躍する研究者による招待講演(§3.1)やラウンドテーブルディスカッション、ポスターセッション(§3.2)、そして懇親会が実施されました。また、今年度は過去3年間で初めて研究交流会の招待講演者として2名の男性研究者の方にもご発表頂きました。研究交流会も含めて ISSP Women's Week 期間中の招待講演者(17名)にはそれぞれのご研究を大変わかりやすくご説明いただき、さらにご自身のキャリアについてもお話いただきました。そのため、他分野の勉強になっただけでなく、人生設計についても大変役立つ内容を聴くことができました。ラウンドテーブルディスカッションのトピックスは参加者の事前アンケートをもとに選定され「研究効率化の工夫」や「ライブイベントの選択」などが話し合われました。ポスターセッションでは物性研内の施設・部門・センターから推薦された方々にご発表いただきました。懇親会では参加者による発言の場も設けられ、様々な意見が飛び交い大変盛り上がりました。研究会閉会後に参加者の希望に沿った内容で物性研究所の見学も行われました。

*1 「やっぱり物理が好き！」 ウェブページ : <https://www.ipmu.jp/ja/20231125-WomenStudents>

*2 「ISSP Women's week 2023」 ウェブページ : <https://sites.google.com/g.ecc.u-tokyo.ac.jp/issp-womens-week>

*3 「未来をのぞこう！」 ウェブページ : <https://park.itc.u-tokyo.ac.jp/kashiwa-stem/>

※リンクからページへ行かない場合は、企画名をご検索ください。



§3.2 ポスター発表*7

| | |
|----------------|--|
| 白井亜美氏 | 「偏光分解テラヘルツ分光による室温シリコンのキャリア分布ダイナミクスとホール伝導の測定」 |
| 亀山理紗子氏 | 「2色レーザー誘起エアプラズマによる広帯域赤外パルスを用いた表面振動分光法」 |
| 石井梨恵子氏 | 「ICP 発光分光分析装置による元素分析」 |
| 今野雅恵氏 | 「微生物ロドプシンが持つ多様な分子機能の解明」 |
| 馬嘉悦氏 | 「Photocatalytic activity of Al-doped SrTiO ₃ 」 |
| 劉一帆氏 | 「Exploring Counterion pKa Variations in best rhodopsin」 |
| 彭詩悦氏 | 「銅酸化物高温超伝導体における超強磁場下での常伝導状態」 |
| 松本遥氏 | 「立方晶 ReSTe の熱電特性と元素置換効果」 |
| 吉岡晴香氏 | 「Cu(997)表面におけるギ酸の水素化反応」 |
| 阪口佳子氏 | 「Pd/Cu(977)表面におけるメタノールの脱水素化反応」 |
| 辻川夕貴氏 | 「銅基板上二次元ホウ素化合物の研究」 |
| Xiaoni Zhang 氏 | 「Clue of Dirac Nodal Fermions for Topological Hydrogen Boride by micro-focused photoemission spectroscopy」 |

*7 ポスター発表者は物性研内の施設・部門・センターよりご推薦いただいた方々です。

§4 おわりに

ISSP Women's Week 2023 の1週間、素晴らしいご講演とお話を多数拝聴することができ、さらに課題提起に対する丁寧な意見交換から多くのことを学ぶことができました。ISSP Women's Week は回を追うごとにダイバーシティの理解が深まる内容となり、グローバルスタンダードのジェンダーエクイリティの意識なども世代を超えて広められているようです。しかしながら女性及び若手研究者に対する問題は依然として山積みで、物性研究所での活動は継続する必要があります、さらに他機関との連携・協力も今後重要であると感じました。

最後になりますが、このたびの ISSP Women's Week

2023 が盛況に終えることができたことについて、本提案者でもあるワーキンググループの皆様、招待講演者、ポスター発表者そして参加者の皆様に厚く御礼申し上げます。そしてご支援いただいたキオクシアホールディングス(株)と日本学術振興会 学術変革領域研究(A)「1000 テスラ超強磁場による化学的カタストロフィー：非摂動磁場による化学結合の科学」に深く感謝申し上げます。また研究交流会の懇親会にて多数の差し入れをしてくださった所員と野澤清和氏、そして期間中に様々なサポートをしてくれた軌道放射物性研究施設の秘書および松田巖研究室の院生のみなさん、本当にありがとうございました。



図1 ISSP Women's Week 2023 研究交流会での集合写真

文責： 松田巖

物性研究所 附属極限コヒーレント光科学研究センター
男女共同参画・ダイバーシティ推進委員会 2023 年度委員長



物性研究所談話会

日時：2024年2月1日(木) 午後3時～午後4時

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

講師：宮田 敦彦

講演題目：メガガウス超強磁場における物性研究

要旨：

磁場は、あらゆる物質系の状態に影響を与える強力な熱力学的パラメータであり、優れた実験ツールとして幅広く利用されている。しかし、「1 テスラ」のゼーマンエネルギーは、たかだか「1 ケルビン」の熱エネルギーに匹敵する程度である。そのため、エネルギースケールの大きな量子マテリアルの理解には、超強磁場（数十～数百テスラ）が広く求められている。東京大学物性研究所は、非破壊型のパルスマグネットにより 100 T 級の磁場発生、そしてマグネットの破壊を伴ってしまうが 1000 T 級の磁場発生を可能としている世界で唯一の研究施設である。

これまで、非破壊と破壊型の両マグネットを駆使して様々な物質群（有機無機ペロブスカイト半導体、フラストレート磁性体、トポロジカル絶縁体など）の強磁場物性研究に取り組んできた。また、今後の研究計画の一つとして、磁性と電子状態が強く結合したファンデルワールス磁性体の磁気光学測定に取り組んでおり、強磁場印加による巨大な線形二色性の制御、そしてバンド端の巨大なエネルギーシフト（磁気クロミズム）を観測している。本講演では、これまで携わってきた強磁場物性研究に触れつつ、今後の研究計画の展望について述べた。

【講師紹介】

宮田先生は令和 5 年 4 月に国際超強磁場科学研究施設に着任されました。宮田研究室は非破壊パルスマグネットの開発と強磁場物性測定を強みとする研究室で、強磁場とレーザーの両方を使った磁気光学分光など特色ある研究を展開しています。着任にあたって、今後の研究の展開などについてご講演いただきました。

標題：非平衡開放系の物性物理

日時：2024年2月1日(木) 午後1時30分～午後2時30分

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

講師：川畑 幸平

要旨：

近年、孤立平衡系を中心とした従来の物性物理の枠組みを越えて、非平衡開放系で実現される物性物理に大きな関心が集まっている。そのようなめざましい進展にも拘らず、非平衡開放系で現れる物性現象は、重要な問題でさえも、依然として理解が確立していない。また、今後のさらなる発展が期待される量子技術分野において、非平衡開放系の理解はさらに重要性を増していくと考えられる。私は、非平衡開放系で現れる多彩な物性現象をはじめとして、物性理論の新しい基礎を確立することを目指して研究してきた。とくに、対称性やトポロジーといった一般的な概念をもとにして、普遍的であるがゆえに種々の実験を記述および予言するような基礎理論を構築し、新しい物性物理を開拓することを目指してきた。本発表では、非エルミート物理における対称性とトポロジーからより最近の成果まで、私のこれまでの研究を概観し、同時にこれからの展望についても議論した。

【講師紹介】

川畑先生は令和 5 年 7 月に物性理論研究部門に着任されました。川畑先生は、非エルミート系など、非平衡開放量子系の分類理論などでよく知られています。本講演会では、今後の関連分野の動向も含め、物性研での研究展開の方向性についてご講演いただきました。

標題：令和 5 年度 退職記念講演会

日時：2024 年 2 月 29 日(木) 午後 3 時～午後 4 時 30 分

場所：物性研究所 6 階大講義室 (A632) (Zoom 配信つき)

要旨：

15:00-15:10 所長挨拶

15:10-15:20 上床 美也 先生 業績紹介

15:20-16:30 上床 美也 先生 ご講演

講演題目 高圧物性研究に出会って 35 年



物性研究所セミナー

標題：軟 X 線吸収分光のすすめ

日時：2023 年 12 月 18 日(月) 午後 1 時～

場所：6 階大講義室&Online

講師：新部 正人

所属：物性研究所 松田巖研究室

要旨：

軟 X 線吸収分光(SXAS)は、放射光分光ビームラインにおいて試料とピコアンメータがあれば出来る簡便な分光分析手法であるが、元素分析、状態分析、分子結合性評価、結晶配向性評価など様々な分析評価ができる。本講演では、筆者が行った、あまり知られていない軟 X 線分光実験を紹介することにより、軟 X 線吸収分光法を理解して頂くための、主に初学者向けのお話をされた。

内容は、軟 X 線吸収分光の定量性評価、全電子収量(TEY)法と全蛍光収量(法での検出深さの評価とその応用、h BN 薄膜における複数 π ピークの同定、薄膜結晶成長の in situ 観測への応用、He path を用いた大気圧下軟 X 線吸収分光法の開発、吸収分光と発光分光の組み合わせで見えるもの、などである。

標題：電場と温度勾配による非線形 Hall 効果の微視的理論

日時：2023 年 12 月 22 日(金) 午後 4 時～午後 5 時

場所：物性研究所 6 階第 5 セミナー室 (A615) 及び Online (Hybrid)

講師：山口 皓史

所属：理化学研究所 CEMS

要旨：

外場に対し非線形に応答する非線形輸送現象が近年注目を集めている。非線形輸送現象は線形応答に対する補正項であるばかりではなく、本質的に異なる現象を引き起こすこともでき、実際に非線形 Hall 効果や電流の非相反伝搬、非線形光学効果といった非線形特有の現象が多く知られている。本研究では特に電場と温度勾配を互いに垂直に印加した場合に、両者の外積に比例する電流が生じる効果(非線形カイラル熱電気(Nonlinear Chiral Thermo-Electric, NCTE) Hall 効果と呼ぶ)に着目する。NCTE Hall 効果は Weyl 粒子系において生じることが報告され[1]、その後半古典論に基づいた解析[2,3]から固体中でも生じることが指摘された。一方で、具体的な固体のモデルで生じることを示した例はなく、また一般のバンド構造に対する微視的な定式化も不十分となっている。

本発表では、一般のバンド構造に対する NCTE Hall 効果を微視的に定式化し、具体的なモデルにおいてそれが発現することを示す[4]。非平衡 (Keldysh) Green 関数を用いて電場と温度勾配の非線形応答を取り扱い、NCTE Hall 効果を定式化する。得られた表式をバンド表示することで、先行研究では現れなかった寄与があることを見る。また、NCTE Hall 効果が生じる簡単なモデルと、カイラル結晶の具体的な強束縛モデルにおいて、実際に NCTE Hall 効果が生じることを示す。

[1] Y. Hidaka, S. Pu, and D.-L. Yang, Phys. Rev. D 97, 016004 (2018).

[2] R. Nakai and N. Nagaosa, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 99, 115201 (2019).

[3] R. Toshio, K. Takasan, and N. Kawakami, Phys. Rev. Res. 2, 032021 (2020).

[4] T. Yamaguchi, K. Nakazawa, and A. Yamakage, arXiv:2305.05273 (2023).

標題：Magnetization and Polarization Switching in a Family of Heterometallic Complexes with Electron Transfer and Spin Transition Behavior

日時：2023 年 12 月 22 日(金) 午前 11 時～午後 0 時

場所：Online

講師：Shu-Qi Wu 助教

所属：九州大学

要旨：

Spin transition behavior in molecular crystals has attracted wide attention in the field of molecular physics and chemistry. By appropriate chemical design, the transition properties (e.g. transition temperature) could be finely tuned. In this talk, we will discuss about the electron dynamics in two systems, i.e. $[(\text{Fe}(\text{RR}\text{-cth}))(\text{M}(\text{SS}\text{-cth}))(\mu\text{-dnhq})]_3\text{X}$ and $[(\text{Co}(\text{RR}\text{-cth}))(\text{M}(\text{SS}\text{-cth}))(\mu\text{-dnhq})]_3$ crystallized in the P2₁ space group (cth = 5,5,7,12,12,14-hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane, H₂ dnhq = 2,5-dihydroxy-1,4-benzoquinone, M = Co, Cr and Ga, X = PF₆⁻ and AsF₆⁻). The former family exhibits a transition process at Fe site with thermally hysteretic behavior, followed by a gradual electron transfer between the Fe and ligand sites. Owing to the asymmetrical changes in the molecular structures and changes in metal-ligand covalency, a substantial polarization change has been observed. Furthermore, these compounds undergo similar processes when subjected to pulsed magnetic fields at lower temperatures, resulting in a comparable polarization change. The latter family exhibits an electron transfer coupled spin transition process at Co site, which leads to a polarization change as large as 2~3 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$. Interestingly, by trapping the electron-transferred metastable state at low-temperatures, a persistent light-induced polarization change could be observed.

標題：高次高調波に着目した非摂動論的な領域における非線形光学の展望

日時：2023 年 12 月 22 日(金) 午後 1 時～午後 2 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室 (A615)

講師：玉谷 知裕

所属：東京大学物性研究所

要旨：

近年高強度テラヘルツ光源開発の進展に伴い、半導体などの固体において非摂動論的な非線形光学現象が観測されるようになった。これらの現象を理解するためには、これまでの摂動論的なアプローチを超えて非摂動論的な領域にまで非線形光学という学問分野を拡張する必要がある。そこで本講演では特に高次高調波発生に焦点を当て、この現象を非摂動論的な領域に拡張する際の方法を示すと共に、理論と実験の比較を行う。そしてこの考え方をを用いて非摂動論的な非線形光学現象の制御法についての議論を行う。

標題：The Self-Learning Monte Carlo Method: Accelerating Simulations with Machine Learning

日時：2023 年 12 月 26 日(火) 午後 1 時～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：Yuki Nagai

所属：Japan Atomic Energy Agency

要旨：

We have introduced a general method, dubbed self-learning Monte Carlo (SLMC), which speeds up the MC simulation by designing and training a model to propose efficient global updates. We have developed the SLMC in various kinds of systems for electrons[1], spins[2], atoms[3], and quarks and gluons[4].

For example, we proposed an efficient approach called self-learning hybrid Monte Carlo (SLHMC) method, which is a general method to make use of machine learning (ML) potentials to accelerate the statistical sampling of first principles density-functional-theory (DFT) simulations[3]. In the SLHMC simulation, the statistical ensemble is sampled exactly at the DFT level for a given thermodynamic condition. Meanwhile, the ML potential is improved on the fly by training to enhance the sampling, whereby the training dataset, which is sampled from the exact ensemble, is created automatically.

In this talk, I will show the basic concept of SLMC and various kinds of applications.

- [1] YN, H. Shen, Y. Qi, J. Liu, and L. Fu, Self-Learning Monte Carlo Method: Continuous-Time Algorithm, Phys. Rev. B 96, 161102 (2017).; YN, M. Okumura, K. Kobayashi, and M. Shiga, Self-Learning Hybrid Monte Carlo: A First-Principles Approach, Phys. Rev. B 102, 041124 (2020).
- [2] H. Kohshiro and YN, Effective Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida-like Interaction in Diluted Double-Exchange Model: Self-Learning Monte Carlo Approach, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 034711 (2021).; YN and A. Tomiya, Self-Learning Monte Carlo with Equivariant Transformer, <http://arxiv.org/abs/2306.11527>.
- [3] YN, M. Okumura, K. Kobayashi, and M. Shiga, Self-Learning Hybrid Monte Carlo: A First-Principles Approach, Phys. Rev. B 102, 041124 (2020).; K. Kobayashi, YN, M. Itakura, and M. Shiga, Self-Learning Hybrid Monte Carlo Method for Isothermal-Isobaric Ensemble: Application to Liquid Silica, J. Chem. Phys. 155, 034106 (2021).
- [4] YN, A. Tanaka, and A. Tomiya, Self-Learning Monte Carlo for Non-Abelian Gauge Theory with Dynamical Fermions, Phys. Rev. D (2023).; Y. Nagai and A. Tomiya, Gauge Covariant Neural Network for 4 Dimensional Non-Abelian Gauge Theory, <http://arxiv.org/abs/2103.11965>.

標題 : Criticality and scale invariance in quantum Hall systems: plateau transitions and self-similarity of response functions

日時 : 2024年1月12日(金) 午後1時30分～

場所 : 物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師 : Gunnar Möller

所属 : Physics and Astronomy, Division of Natural Sciences, University of Kent

要旨 :

Since the realisation that quantum Hall liquids represent topologically ordered phases, the search for new topological states of matter has been a central endeavour in condensed matter physics. Interacting particles in flat band models provide a host of opportunities for creating novel topological phases, baptised fractional Chern insulators (FCI), which are based on realisations of synthetic magnetic fields. First materials realisations have recently been discovered in twisted MoTe2 bilayers.

The interacting Hofstadter model gives blueprint examples for FCI phases, as predicted by composite fermion theory [1]. We will first review exact diagonalisation results for FCI states stabilised in single Chern bands, and demonstrate that finite-size effects are minimised in the quasi-continuum limit of perfectly flat bands near flux densities $n\phi \rightarrow 1/|C|$ [2,3,4]. We will then discuss a new class of interaction-driven quantum Hall plateau transitions occurring in the Hofstadter model, which arise from the competition of Chern insulator states at weak interaction with FCI states realised at the same particle density for strong interactions. In one such case, our DMRG data at flux density $n\phi=3/11$ presents a direct transition between a $C=4$ Chern Insulator and a $\nu=1/3$ Laughlin state, and we examine its exotic critical properties [5]. Even in the non-interacting case, Chern insulators provide new phenomenology in quantum Hall plateau transitions. We will present data on the case of the Haldane model, where the topological $C=1$ Chern

insulator can be destabilised either by increasing disorder or by increasing the effective mass parameter. In our study of the critical behaviour of these two transitions [6], we demonstrate in particular that the mass-driven transition displays critical exponents which vary continuously with the disorder strength. Finally, going beyond ground state properties of quantum Hall systems, we will expose self-similar features of the dynamical response functions arising for a Laughlin state probed at energies lying above the scale of the single-particle gap [7].

Möller, G. & Cooper, N. R. Composite Fermion Theory for Bosonic Quantum Hall States on Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 103, 105303 (2009).

Möller, G. & Cooper, N. R. Fractional Chern Insulators in Harper-Hofstadter Bands with Higher Chern Number. *Phys. Rev. Lett.* 115, 126401 (2015).

Andrews, B. & Möller, G. Stability of fractional Chern insulators in the effective continuum limit of Harper-Hofstadter bands with Chern number $|C| > 1$. *Phys. Rev. B* 97, 035159 (2018).

Andrews, B., Neupert, T. & Möller, G. “Stability, phase transitions, and numerical breakdown of fractional Chern insulators in higher Chern bands of the Hofstadter model” *Phys. Rev. B* 104, 125107 (2021).

Schoonderwoerd, L., Pollmann, F. and Möller, G. Interaction-driven plateau transition between integer and fractional Chern Insulators, arxiv:1908.00988 – v2: 2022.

6 J. Mildner, M. D. Caio, G. Möller, N. R. Cooper, and M. J. Bhaseen, Topological Phase Transitions in the Disordered Haldane Model, arxiv:2312.XXXXX (in submission).

Andrews, B. & Möller, G. Self-similarity of spectral response functions for fractional quantum Hall states. *Proc. R. Soc. A* 479, 20230021 (2023).

標題：Electron spectro-microscopy of the local chemistry and structure of 2D materials

日時：2024年1月15日(月) 午後4時～

場所：物性研究所本館6階A615 (第5セミナー室) & Online

講師：Dr. Jerzy T. Sadowski

所属：Center for Functional Nanomaterials, Brookhaven National Laboratory

要旨：

The ongoing miniaturization in technological devices and the progress in surface science demand novel instrumental methods for surface characterization on a length scale of only a few atomic distances. The combination of an x-ray photoelectron emission microscope (XPEEM) or low-energy electron microscope (LEEM) is a powerful technique for studying the dynamic and static properties of 2D materials surfaces and thin films including growth and decay, phase transitions, reactions, surface structure and morphology. It utilizes low energy electrons to image surfaces with few nm lateral resolution and atomic layer depth resolution. In the LEEM/XPEEM setup, when using the electron irradiation, the backscattered electrons, Auger and secondary electrons may be used, while photoelectrons, Auger and secondary electrons are utilized for imaging when sample is irradiated with photons. In this talk I will present examples of the application of the LEEM/XPEEM technique to the investigations of novel materials, including 2D layered materials, thin films, and adsorbate structures. I will also introduce the Center for Functional Nanomaterials (CFN) and National Synchrotron Light Source II (NSLS-II) user facilities at the Brookhaven National Laboratory for fabrication and characterization of 2D materials and beyond.

This research used resources of the Center for Functional Nanomaterials and the National Synchrotron Light Source II, which are U.S. Department of Energy (DOE) Office of Science facilities at Brookhaven National Laboratory, under Contract No. DE-SC0012704.

標題：強相関電子物質における多層膜試料の核磁気共鳴

日時：2024年1月19日(金) 午前11時～午後0時

場所：Online

講師：山中 隆義 特任助教

所属：東北大学金属材料研究所

要旨：

近年の成膜技術の進歩によって、実に様々な物質が薄膜として作製可能になっている。この技術は物質の人工的な2次元化や表面・界面の効果の顕在化、電子状態を人工的に制御する技術としても注目されている。

このように膜試料は研究の舞台として重要であるが、その物質量が少ないためにマイクロなプローブによる実験は困難である。核磁気共鳴法(NMR)もその例には漏れないが、強磁場を用いたりヘテロ構造を多層作製するなどの工夫で困難を幾らか克服可能となる。

本セミナーでは我々の成果である重い電子系人工超格子膜の研究を中心に[1, 2], NMRによる膜試料の研究例を紹介した。

[1] T. Yamanaka, et al., Phys. Rev. B 92, 241105 (2015).

[2] G. Nakamine, et al., Phys. Rev. B 99, 081115 (2019).

標題：Emerging Physics of Alternative Charge-Density Wave in 1T-Transition Metal Dichalcogenides

日時：2024年1月22日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Gil-Young Cho

所属：Pohang University of Science and Technology (POSTECH)

要旨：

1T-transition metal dichalcogenides (TMD) have been an exciting platform for exploring the intertwinement of charge density waves and strong correlation phenomena. While the David star structure has been conventionally considered as the underlying charge order in the literature, recent scanning tunneling probe experiments on several monolayer 1T-TMD materials have motivated a new, alternative structure, namely the anion-centered David star structure. In this paper, we show that this novel anion-centered David star structure manifestly breaks inversion symmetry, resulting in flat bands with pronounced Rashba spin-orbit couplings. These distinctive features unlock novel possibilities and functionalities for 1T-TMDs, including the giant spin Hall effect, the emergence of Chern bands, and spin liquid that spontaneously breaks crystalline rotational symmetry. Our findings establish promising avenues for exploring emerging quantum phenomena of monolayer 1T-TMDs with this novel noncentrosymmetric structure.

標題：NanoTerasu 超高分解能軟 X 線 RIXS で挑む物性研究

日時：2024年1月22日(月) 午後1時～

場所：6階第一会議室 & Online

講師：宮脇 淳

所属：量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設整備開発センター 主任研究員

要旨：

2024年4月から運用が開始されるナノテラスでは、10本のビームライン(共用BL: 3本、コアリジョンBL: 7本)が建設・立ち上げ中で、超高分解能 共鳴非弾性軟 X 線散乱(RIXS)装置は共用BLの1本として設置される。

RIXSは、物質に共鳴条件でX線を照射し、散乱X線のエネルギーを計測して入射エネルギーとの差を求めることで、

低エネルギー励起のエネルギーと運動量の分散関係を得ることができる分光手法である。

固体には、電荷、軌道、スピン、格子の自由度があるが、RIXS はこれら全ての励起を観測することができ、物性研究には非常に適した手法である。ただし、目的の励起を観測するためには高いエネルギー分解能が必要であり、近年、Cu L-edge で 50 meV を切る装置が開発され、RIXS の真価を発揮しつつある[1,2]。

Nano Terasu の RIXS 装置では、分解能 10 meV という目標を掲げて、長らく設計、開発、建設を行ってきた[3]。

2024 年 1 月時点で、建設がおおむね完了し、4 月からの試験的共用を経て、2024 年度末の共用開始に向けて立ち上げ・調整を進めている。セミナーでは、ビームライン、RIXS 分光器の概要と建設状況について紹介し、利用研究に対する展望についても述べた。

[1] N. B. Brookes et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 903, 175–192 (2018).

[2] K.-J. Zhou et al., J. Synchrotron Rad. 29, 563–580 (2022).

[3] J. Miyawaki et al., J. Phys. Conf. Ser. 2380, 012030 (2022).

標題 : First-principles and machine learning study of anharmonic vibration and dielectric properties of materials

日時 : 2024 年 1 月 26 日(金) 午後 4 時~午後 5 時

場所 : Online and Seminar Room 5 (A615), ISSP (Hybrid)

講師 : Tomohito AMANO

所属 : Department of Physics, The University of Tokyo

要旨 :

The computational simulation of the dielectric response of materials is essential for both analyzing experimental spectra and developing new materials. To accurately calculate the dielectric function, the classical static charge is often insufficient, and the Born effective charges or the mass center of the Wannier function (Wannier center) are required to describe the dipole moments of a system.

For crystals, where the Born effective charges are used to calculate dipoles, we have combined the self-consistent phonon method [1] and the linear response theory to predict the dielectric function of highly anharmonic crystals. I will present the accuracy of our method through applications to strongly anharmonic rutile TiO₂ [2].

For liquids, anharmonic phonon methods are not available, and one resorts to molecular dynamics (MD) simulations. To calculate the system dipoles efficiently and accurately, we have extended the previously proposed method predicting molecular dipoles [3] and developed a versatile machine-learning model of dipole moments predicting the Wannier centers assigned to the chemical bonds [4]. In this talk, I will present the applications to several liquid alcohols and discuss their dielectric properties.

[1] T. Tadano and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 92, 054301 (2015).

[2] T. Amano, T. Yamazaki, R. Akashi, T. Tadano, and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 107, 094305 (2023).

[3] A. Krishnamoorthy, K. Nomura, N. Baradwaj, K. Shimamura, et al, Phys. Rev. Lett. 126, 216403 (2021).

[4] T. Amano, T. Yamazaki, and S. Tsuneyuki, in preparation.



標題：物質科学におけるデータ同化手法開発と応用

日時：2024年1月29日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所6階第5セミナー室 (A615) 及び Online (Hybrid)

講師：原嶋 庸介

所属：奈良先端科学技術大学院大学

要旨：

物質科学において本来理論と実験は共通の目標を持つものだが、専門性が細分化された結果、これらを協調させるためには橋渡しが必要である。データ同化はシミュレーションと実験データを統合することで予測モデルを構築する機械学習的技術であり、理論と実験の相乗効果が期待できる。本講演ではデータ同化による物性予測モデル構築の実例と、最近開発したデータ同化と Bayes 最適化を組み合わせた物質探索手法を紹介した。

標題：Towards the applications of ab initio Quantum Monte Carlo in Materials Science

日時：2024年1月29日(月) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：中野 晃佑

所属：物質・材料研究機構 (NIMS), マテリアル基盤研究センター (CBRM)

要旨：

Ab initio quantum Monte Carlo (QMC) techniques [1], such as variational quantum Monte Carlo (VMC) and diffusion quantum Monte Carlo (DMC), are state-of-the-art numerical methods to obtain highly accurate many-body wave functions. These methods are essential when tackling challenging compounds that cannot be treated correctly within the Density Functional Theory (DFT) framework. In this seminar, I will talk about an overview of ab initio QMC methods and introduce our QMC packages, TurboRVB [2] and TurboGenius [3]. I will also talk about recent algorithmic progress in atomic force calculations using QMC. One of the major drawbacks that hinders widespread QMC applications, especially in the materials science community, is the lack of an affordable scheme to compute atomic forces consistent with the derivatives of the potential energy surface, a.k.a. unbiased atomic forces. This is trivial within the DFT framework, but it is one of the long-standing problems in QMC. Very recently, we have proposed a very efficient method to obtain unbiased atomic forces and pressures in the Variational Monte Carlo (VMC) framework, exploiting the gauge-invariant and locality properties of its geminal representation [4]. I will demonstrate the effectiveness of our method for Hydrogen and Chlorine molecules and for the cubic boron nitride crystal.

[1] W. Foulkes, L. Mitas, R. Needs, and G. Rajagopal, Rev. Mod. Phys. 73, 33 (2001).

[2] K. Nakano, et al. J. Chem. Phys. 152, 204121 (2020).

[3] K. Nakano, et al. J. Chem. Phys. 159, 224801 (2023).

[4] K. Nakano, et al. arXiv:2312.17608 (2023).

標題：Direct Visualization of Electronic Liquid Crystal Phases in Correlated Dirac Nodal Line Semimetal GdSbTe

日時：2024年2月2日(金) 午後2時～

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615) & Online

講師：Prof. Tien-Ming Chuang

所属：Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan

要旨：

Electronic liquid crystal (ELC) phases are spontaneous symmetry breaking states arisen from strong electron correlation in solids such as cuprates and iron pnictides. Topological materials with symmetry protected Dirac or Weyl fermions, however, are mostly weakly correlated so the occurrence of ELC is rare thereof. Here, we report a direct observation of ELC phases in Dirac nodal line (DNL) semimetal GdSbTe_{2-x}. We discover real-space electronic nanostructures of incommensurate checkerboard modulation and intense local nematic order. We show chemical substitution generates local electronic nematicity and increases Peierls instability towards incommensurate checkerboard modulation before undergoing a charge density wave – orthorhombic transition. We also observe nematicity in our quasiparticle scattering interference imaging, which detects linearly dispersive q-vectors, consistent with the calculated topological band structure scattering off C₂-symmetric dopants. Our results on correlated DNL semimetal, GdSbTe_{2-x} highlight the importance of dopant atoms in the ELC phases, opening a pathway towards a further microscopic understanding of the interplay among disorder, topology and electron correlation.

標題：Hall-effect studies on unconventional quantum materials under challenging conditions

日時：2024年2月7日(水) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所6階第5セミナー室 (A615) 及び Online (Hybrid)

講師：Toni Helm

所属：Dresden High Magnetic Field Laboratory, Helmholtz Zentrum Dresden Rossendorf

要旨：

In order to uncover and understand the physics of topological quantum materials, experiments are pushed to their limits in terms of setup dimensions and resolution. Challenging conditions, such as very low temperatures, high pulsed-magnetic fields, strong pressures or microscopically small but well-defined sample dimensions are inevitable for successful investigations. We apply focused ion beam (FIB) micro-patterning for the fabrication of micron-scale structures from bulk single crystals suitable for high precision electrical transport experiments. This approach has proven a powerful tool for experiments on various compounds with intriguing transport properties. In particular, Hall effect signals can be optimized by means of reducing the sample thickness to few microns.

In this talk, I will exemplify some of our recent projects that benefited from FIB assisted patterning and uncovered new physics in topological materials [1-4]. In the first examples, I will show how we can contribute to the field of unconventional magnetism. I will present recent results from electrical-transport experiments that we combined with microscopic magneto-sensitive imaging tools. This enabled us to study finite size-effects and reveal the Hall signature, comprised of anomalous and topological contributions, of Antiskyrmions in the Heusler magnet Mn_{1.4}PtSn [1] and that of Skyrmion bubbles in the hard magnet MnBi [2]. We, furthermore, study highly conductive heavy-fermion metals in pulsed magnetic fields up to 70 T. In our recent work on the potential spin-triplet superconductor UTe₂, we revealed a correlation between the emergence of reentrant superconductivity in fields above 40 T and the vanishing of the anomalous Hall effect. The vanishing and reemerging of the Hall signature within a particular field-orientation range, hints at a field-induced compensation of magnetic exchange, the so-called Jaccarino-Peter effect, as the potential

origin of reentrant high-field superconductivity in UTe₂ [3,4].

[1] Winter, M., Goncalves, F.J.T., Soldatov, I., et al.

“Antiskyrmions and their electrical footprint in crystalline mesoscale structures of Mn_{1.4}PtSn.” *Commun. Mater.* 3, 102 (2022).

[2] He, Y., Schneider, S., Helm, T., et al.

“Topological Hall effect arising from the mesoscopic and microscopic non-coplanar magnetic structure in MnBi.” *Acta. Mater.* 226, 117619 (2022).

[3] Niu, Q., Knebel, G., Braithwaite, D., Helm, T., et al.

“Evidence of Fermi surface reconstruction at the metamagnetic transition of the strongly correlated superconductor UTe₂.” *Phys. Rev. Res.* 2, 033179 (2020).

[4] Helm, T., Kimata, M., Sudo, K., et al.

“Field-induced compensation of magnetic exchange as the possible origin of reentrant superconductivity in UTe₂.” *Nat Commun* 15, 37 (2024).

標題 : Spin Supersolidity and Giant Magnetocaloric Effect in a Triangular Lattice Quantum Antiferromagnet

日時 : 2024年2月14日(水) 午前10時30分~午前11時30分

場所 : Online

講師 : Prof. Wei Li

所属 : Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences

要旨 :

Supersolid is an exotic quantum state of matter that emerges near absolute zero temperature. The spin supersolid spontaneously breaks both the lattice translational and spin rotational symmetries, forming a quantum magnetic analog of supersolid. Recently, using tensor network approaches [1,2], we determined the microscopic spin Hamiltonian of a Co-based quantum antiferromagnet Na₂BaCo(PO₄)₂. We discovered that it represents a rare and nearly perfect realization of the easy-axis triangular lattice Heisenberg model, and therefore supports the long-sought spin supersolid state [4]. We further predict theoretically and, in conjunction with experimental collaborators, observe a significant entropic effect related to this unique and highly fluctuating spin state – spin supersolid cooling [5].

[1] B.-B. Chen, L. Chen, Z. Chen, WL, and A. Weichselbaum, Exponential thermal tensor network approach for quantum lattice models. *Phys. Rev. X* 8, 031082 (2018).

[2] Q. Li, Y. Gao, Y.-Y. He, Y. Qi, B.-B. Chen, and WL, Tangent Space Approach for Thermal Tensor Network Simulations of the 2D Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.* 130, 226502 (2023).

[3] Y. Gao, Y. Fan, H. Li, [...], Y. Wan, and WL. Spin supersolidity in nearly ideal easy-axis triangular quantum antiferromagnet Na₂BaCo(PO₄)₂. *Npj Quantum Mater.* 7, 89 (2022).

[4] J. Xiang, C. Zhang, Y. Gao, [...], W. Jin, WL, P. Sun, G. Su, Giant magnetocaloric effect in spin supersolid candidate Na₂BaCo(PO₄)₂, *Nature* 625, 270–275 (2024).

標題：Exploiting Hidden Low-Rank Structures in Physics

日時：2024年2月16日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Hiroshi SHINAOKA

所属：Saitama University

要旨：

Tensor networks are a powerful tool for compressing wave functions and density matrices of quantum systems in physics. Recent developments have shown that tensor network techniques can efficiently compress many functions beyond these traditional objects. Notable examples include the solutions to turbulence in Navier–Stokes equations [1] and the computation of Feynman diagrams [2,3]. These advancements have heralded a new era in the use of tensor networks for expediting the resolution of various complex equations in physics.

In this presentation, I will overview our recent research in this domain. Initially, I will discuss the compression of the space-time dependence of the correlation function in quantum systems [3] through the use of the “Quantics Tensor Train.” [4,5] This method leverages the inherent length-scale separation in the system to efficiently represent the function. Our approach demonstrates solving diagrammatic equations in a compressed format.

Subsequently, I will introduce a novel and robust tool named “Quantics Tensor Cross Interpolation.” [6] This method is designed to learn a quantics low-rank representation of a given function, showcasing the versatility and potential of tensor network techniques in handling complex functions in physics.

[1] N. Goulianov et al., Nat. Comput. Sci. 2, 30 (2022).

[2] Y. N. Fernandez et al., PRX 12, 041018 (2022).

[3] H. Shinaoka et al., PRX 13, 021015 (2023).

[4] I. V. Oseledets, Dokl. Math. 80, 653 (2009).

[5] B. N. Khoromskij, Constr. Approx. 34, 257 (2011).

[6] M. K. Ritter, ..., H. Shinaoka and X. Waintal, PRL 132, 056501 (2024).

標題：座標変換不変な自由エネルギー地形の導出

日時：2024年2月21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号室) 及び Online (Hybrid)

講師：中村 壮伸

所属：産業技術総合研究所

要旨：

従来もちいられている自由エネルギー地形(FEL)の定義は、反応座標の選択に関して非物理的な依存性を示すため、普遍的な予測能力に欠けています[1]。ここでは、物理的に妥当な3つの要請に基づいて、与えられた反応座標に対するFELの公式を一意的に導出します[2]。我々のFELの公式は非物理的な座標依存性がなく、特殊な場合には従来のFELの定義と一致します。さらに我々のFELは、時系列データ解析によって得られる量、つまり確率分布と拡散行列だけで表現されます。これらの性質は、我々のFELが普遍的な予測能力を持っていることを意味します。

[1] D. Frenkel, Eur. Phys. J. Plus 128, 10 (2013).

[2] T. N. <https://arxiv.org/abs/1803.09034>



標題：New magnetotransport phenomena in Fe-doped ferromagnetic semiconductors and quantum heterostructures

日時：2024年2月21日(水) 午後1時15分～午後2時15分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Le Duc Anh

所属：Department of Electrical Engineering and Information Systems, The University of Tokyo

要旨：

Ferromagnetic semiconductors (FMS), which inherit properties of both semiconductors and ferromagnetic materials, are realized by doping a certain amount (several %) of magnetic elements in semiconductors. In the past, most of the research has been dedicated to Mn-doped III-V FMSs, which are only P-type and the highest Curie temperature (T_C) is 200 K. Recently, we presented an alternative approach by using Fe instead of Mn as the magnetic dopants in narrow-gap III-V semiconductors like InAs, GaSb, and InSb. Using low-temperature molecular beam epitaxy (MBE), we have successfully grown both P-type FMS [(Ga,Fe)Sb] [1] and N-type FMSs [(In,Fe)As [2,3], (In,Fe)Sb [4]]. Intrinsic room-temperature ferromagnetism has been observed in (Ga $_{1-x}$,Fe $_x$)Sb with $x > 23\%$ [1] and (In $_{1-x}$,Fe $_x$)Sb with $x > 16\%$ [4].

In this talk, we present new novel magnetotransport physics in bilayer structures of a nonmagnetic (NM) material and an Fe-doped FMS, where a magnetic proximity effect (MPE) from the FMS is expected to affect the NM channel. The sample structure consists of InAs (thickness $t = 15 - 40$ nm)/(Ga,Fe)Sb (15 nm, 20% Fe) grown on AlSb buffer/semi-insulating GaAs (100) substrates (Fig. 1a,b). We found that a strong and long-range MPE is induced at the InAs/(Ga,Fe)Sb interface, resulting in a spontaneous spin splitting ΔE , as large as 18 meV, in the InAs channel[5,6]. Furthermore, this spin splitting ΔE can be largely modulated by applying a gate voltage V_g . We observed a giant even-parity magnetoresistance ($\sim 80\%$ at 14 T), which we call proximity magnetoresistance (PMR) [5,6], and a large odd-parity linear magnetoresistance (OMR) [7], corresponding to a resistance change of 27% when the perpendicular-to-plane magnetic field B ($=10$ T) direction is reversed. The unprecedented large OMR was found to occur in the edge transport channels of the InAs thin film, due to simultaneous breaking of both the space inversion symmetry (SIS) and the time reversal symmetry (TRS) (Fig. 1a). These new features realized in the Fe-doped FMSs and their quantum heterostructures are particularly important for the applications of low-power and high-speed spin-based electronics. Furthermore, the gate-controllable spin splitting provides a mechanism to locally access Majorana fermions in InAs-based Josephson junctions [8]. These works were partly supported by Grants-in-Aid for Scientific Research, the CREST and PRESTO Programs of JST, the UTEC-UTokyo FSI program, Murata Science Foundation and Spin-RNJ.

標題：研究戦略室セミナー：PRX What kind of papers we are looking for?

日時：2024年2月22日(木) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 大講義室(A632)

講師：Dr. Yiming Xu

所属：Associate editor of Physical Review X

要旨：Speaker: Dr. Yiming Xu

(Associate Editor of Physical Review X)

PRX is published by the American Physical Society, a nonprofit membership society of scientists. Its mission goal is to select around 250 landmark papers a year from all fields of physics and showcase them to a broad and multidisciplinary readership.

Is your paper a good match for PRX? Or asked differently, what papers qualify as landmark papers? How do the PRX editors actually select such papers? Are such selections always accurate? How can you, as an author, navigate

PRX's editorial and peer-review process effectively and get the most out of your interactions with the editors and referees? I will use the talk to discuss with you how to answer these questions. Many of these questions do not have a black-and-white answer in the case of a single paper. Open-minded, reasoned, and constructive dialogues amongst the authors, the editors, and the referees are key to making each concrete process a meaningful and productive experience, and sometimes even a pleasure, for everyone.

標題：Simulating endosomal escape of lipid nanoparticles: A coarse-grained molecular dynamics study

日時：2024年3月11日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所6階第5セミナー室 (A615) 及び Oline (Hybrid)

講師：篠田 渉

所属：岡山大学 異分野基礎科学研究所

要旨：

We illustrate here our recent application study of our quantitative coarse-grained model; SPICA force field[1-4], to investigate the endosomal escape mechanism of lipid nanoparticles(LNPs). LNPs are one of the most promising non-viral gene delivery carriers.

LNPs have recently been employed in mRNA vaccines and are expected to have applications in cancer therapy and regenerative medicine. LNPs administered to the body enter the cell by endocytosis. Nucleic acids must be released into the cytoplasm before they are degraded by a drop in pH in the endosome (transfection), but in many cases, only a few percent are released.

The molecular mechanism is still elusive because it occurs at the nanoscale. Therefore, Clarifying this phenomenon through molecular dynamics (MD) simulations will enable a more effective design of LNPs with high drug release efficiency.

In this study, a series of large-scale coarse-grained MD simulations of LNPs fusing to endosomal membranes has been performed using the SPICA force field. In particular, the fusion mechanism of LNPs with the endosomal membrane was examined in the context of the efficiency of the endosomal escape.

We would also like to show the performance of the SPICA force field for this complex system, including a variety of lipids, sterols, and nucleic acids.

[1] Seo & Shinoda, J. Chem. Theory Comput. 15, 762 (2019).

[2] Kawamoto et al., J. Chem. Theory Comput. 18, 3204 (2022).

[3] Yamada et al., J. Chem. Theory Comput. 19, 8967 (2023).

[4] URL <https://www.spica-ff.org/>



東京大学物性研究所人事異動一覧

【研究部門等】

| 発令日 | 氏名 | 部門・施設名等 | 職名 | 備考 |
|-----|----|---------|----|----|
|-----|----|---------|----|----|

〈採用〉

| | | | | |
|---------|------------------------|----------------|------|--|
| R6.2.14 | 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 強磁場グループリーダーより |
| R6.3.1 | MARCENAT Christophe | 附属国際超強磁場科学研究施設 | 特任教授 | グルノーブル学際研究所・光子量子学・電子 工学・工学研究所 教授より |

〈任期満了〉

| | | | | |
|----------|------------------|----------------|------|---------------------------------------|
| R5.12.15 | 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 強磁場グループリーダーへ |
| R6.3.14 | 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 強磁場グループリーダーへ |

東京大学物性研究所教員公募について

1. 職名および人数

助教 1名

2. 所属

物性研究所ナノスケール物性研究部門（Lippmaa 研究室）

3. 就業場所

物性研究所柏キャンパス（千葉県柏市柏の葉 5-1-5）

変更の範囲：変更がある場合には、本学の指定する場所に限る。ただし、配置換又は出向を意に反して命じられることは原則としてない。詳細は東京大学教員の就業に関する規程第4条による。

4. 公募・業務内容

リップマー教授と協力して、パルスレーザー堆積による酸化物薄膜の合成、新材料の開発、薄膜やヘテロ構造および表面の特性評価を行う若手研究者を募集する。例えば、酸化物エピタキシャル結晶の新しい物性研究、光触媒におけるキャリアダイナミクス、低次元構造、準安定材料合成、電子回折データの機械学習解析に基づく自律合成などの研究に興味があり、また物性研究所内外で共同研究に取り組む意欲のある研究者が望ましい。

変更の範囲：配置換、兼務及び出向を命じることがある。ただし、意に反して命じられることは原則としてない。詳細は東京大学教員の就業に関する規程第4条による。

5. 応募資格

博士号または同等の資格を有する、または着任までに取得見込の方

6. 契約時期

採用決定後なるべく早い時期

7. 任期

任期は5年とする。ただし、再任は可とし1回を限度とする。

8. 試用期間

採用された日から14日間（東京大学教職員就業規則第8条による）

9. 応募締切

令和6年5月31日（金）必着

10. 提出書類

（イ）応募の場合

○履歴書（東京大学統一履歴書（<https://www.u-tokyo.ac.jp/ja/about/jobs/r01.html>）を用いること）

○業績リスト（特に重要な論文に○印を付けること）

○主要論文の別刷（3編、コピー可）

○研究業績の概要（A4用紙2-3枚程度）

○研究計画書（A4用紙2-3枚程度）

○応募者についての推薦書、または、意見書（作成者から issp-jinji@issp.u-tokyo.ac.jp へ直送）

（ロ）推薦の場合

○推薦書

○履歴書（東京大学統一履歴書（<https://www.u-tokyo.ac.jp/ja/about/jobs/r01.html>）を用いること）

○業績リスト（特に重要な論文に○印を付けること）

○主要論文の別刷（3編、コピー可）

○研究業績の概要（A4用紙2-3枚程度）



編集後記

当初の予報では3月20日頃とされていた桜の開花が、寒の戻りと長雨により平年よりも遅れることとなったものの、ようやく開花宣言がなされ、改めて近く花盛りの頃のお花見を楽しみにしながら、この編集後記を書いています。

さて、今回の物性研だよりでは、4件の研究紹介記事が掲載されており、1件目のご研究では、7 eV レーザーを用いたレーザーARPES 計測により、CsV₃Sb₅ のカゴメ格子の超伝導ギャップが極めて高精度で調べられ、CsV₃Sb₅ の超伝導ペアリングの新たなメカニズムが明らかとされています。2 件目では、新たな記憶媒体として期待される、Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ のストレス印加に伴う絶縁破壊過程を調べ、従来の操作型電子顕微鏡(SEM)では検出が困難であった電極に埋もれた領域での Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ の電子状態の変化を見るという、レーザー励起光電子顕微鏡(laser-PEEM)を用いたオペランド観察の力を遺憾なく発揮したご研究が紹介されています。また3件目ではグラファイトの磁場を変化させたときの量子振動ピークが、比熱のみ2重ピーク構造を示すことを示したご研究が、詳しい理論的説明と共に紹介されています。そして4件目のご研究では、マイクロメートルオーダーのニッケル三角格子に磁場を印加することで、左右に伝搬する表面弾性波の間で三角格子を透過する効率に差が生じ、波のバレー制御が可能であることが示されました。

また新たに所員として着任された川畑先生からは、「物性研に着任して」で、人間的な営みに強いご興味を抱かれている一方で、物理学において人が生み出すフィクショナルな概念がもたらす物語の素晴らしさと、そこへさらに新たな概念を提示するご自身の研究への取り組みが魅力的な文章で語られています。いずれも今後のさらなるご発展を期待せずにはいられない内容となっておりますので、ぜひ春の陽気と新年度への期待感と共にご一読ください。

井上圭一

【第63号第4号の訂正について】

令和6年1月に発行しました「物性研だより第63巻第4号」につきまして、下記の通り記載に誤りがございました。

P44 「東京大学物性研究所人事異動一覧」

【辞職】

(誤) R5.9.30 森 泰蔵 ナノスケール物性研究部門 助教 京都大学科学研究所 准教授へ

(正) R5.9.30 森 泰蔵 ナノスケール物性研究部門 助教 京都大学化学研究所 准教授へ

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