

物性研だより

# BUSSEIKEN DAYORI

第64巻

第2号

2024年度

硬くて丈夫なゲル電解質  
—フレキシブル電池の耐久性向上に期待—

量子磁性体におけるマグノン安定性の磁場制御

音波を閉じ込めてスピン波との強結合を室温で実証  
—スピン波-音波を活用した新しいデバイスへ道—

極値統計学でモータータンパク質の物性評価  
—キネシンとダイニンの輸送速度の上限に相違を発見—



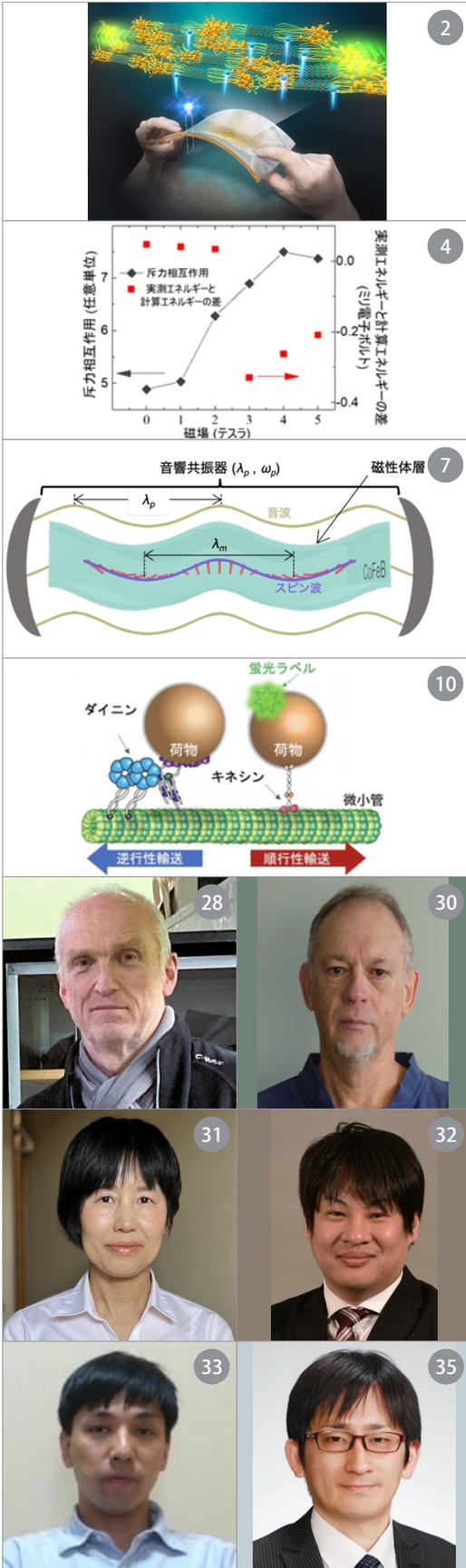
東京大学 物性研究所

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	「物性科学研究教育助成基金」創設とご支援のお願い	
2	硬くて丈夫なゲル電解質 —フレキシブル電池の耐久性向上に期待—	眞弓 皓一
4	量子磁性体におけるマグノン安定性の磁場制御	菊地 帆高、益田 隆嗣
7	音波を閉じ込めてスピン波との強結合を室温で実証 —スピン波 - 音波を活用した新しいデバイスへ道—	大谷 義近
10	極値統計学でモータータンパク質の物性評価 —キネシンとダイニンの輸送速度の上限に相違を発見—	林 久美子
12	第28回日本放射光学会奨励賞を受賞して	坂本 祥哉
13	日米先端工学シンポジウム Most Interactive Presenter's Award を受賞して	林 久美子
15	「テラヘルツ科学の最先端 X」優秀学生発表賞を受賞して	小川 宏太郎
16	精密工学会ベストプレゼンテーション賞を受賞して	吉永 享太
17	International Symposium on Quantum Electronics 2024 「Award of Excellence in the poster presentation」を受賞して	吉田 大希
18	2023 Rising Stars Collection に選出されて	一色 弘成
19	ISSP 学術奨励賞を受賞して	永井 瞭
21	本多記念研究奨励賞を受賞して	井手上 敏也
23	Winning the Award of Excellence in the poster presentation in TSQS2024	Junhyeok Jeong
25	JSR2024 学生発表賞を受賞して	櫻井 快
26	2023年度触媒学会教育賞を受賞して	吉信 淳
27	日本物理学会 領域9 学生優秀発表賞を受賞して	阪口 佳子
28	外国人客員所員を経験して	Oliver Portugal
30		Christophe Marcenat
31	客員所員を経験して	樋山 みやび
32		塚原 規志
33		星 健夫
35		貞清 正彰

【物性研究所短期研究会】

36	○「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」報告
42	○「理論・実験の融合研究：ルシフェリン-ルシフェラーゼ反応」
47	○物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の現在と未来」報告

【ISSP ワークショップ】

52	○第1回 東大 ISSP・理研 CEMS 連携ワークショップ
53	○デバイス活用で臨む有機伝導体の未来

【物性研究所談話会】

56

【物性研究所セミナー】

57

【物性研ニュース】

64	○東京大学物性研究所人事異動一覧
67	○令和5年度外部資金の受入について
69	○東京大学物性研究所教員公募について

編集後記  
物性研だよりの購読について

# 「物性科学研究教育助成基金」創設とご支援のお願い

東京大学物性研究所は2024年4月に「物性科学研究教育助成基金」を創設しました。これは東京大学基金制度を利用して、個人、団体、企業の皆様から幅広くご寄付を募り、物性研の研究教育活動を支えていただく試みです。すでに2023年度から開始している物性研の「量子物質ナノ構造ラボ(Qナノラボ)プロジェクト基金」では、これまで培ってきたマテリアルズサイエンスとナノサイエンスを融合させ、量子科学・量子技術に革新をもたらすことを目指す研究活動への援助をお願いしてきました。今回の「物性科学研究教育助成基金」は、物性研の研究教育活動全般をご支援いただくもので、若手が主体となるプロジェクト研究や学生の海外渡航、さらには女性研究者を増やす活動が念頭に置かれています。

物質科学の歴史を眺めると、未知の現象や物質が発見され、その基礎的理解が何らかの材料開発に結びついたとき、社会に大きなインパクトをもたらし、世界が大きく発展してきたことが分かります。すぐに利益に繋がる応用研究も重要ですが、真にブレークスルーをもたらす発見は常に長年にわたる基礎研究の先にあり、一見無益に見える研究も将来革新的な材料や技術に繋がる可能性を秘めています。

そのような研究活動を維持していくためには、未来の物性科学を担う若手研究者や学生達が自由な発想に基づき、新しいことに挑戦できる環境づくりが重要です。知識を吸収しすぎて頭の固くなった年寄りには己の成功体験に引きずられがちですが、真っ白な若手は自分の興味と好奇心に従って未知の分野を切り拓くチャンスと時間を持っています。研究や実験は、主に国の予算や企業との共同研究経費によりサポートされますが、未知への挑戦や革新的な研究を試行する萌芽的な研究助成にはさらなる支援が必要となります。本基金はそのような若手の挑戦を援助するプログラムの創成に利用させていただく予定です。

物性研は女性研究者支援にも尽力しています。物性研究分野は女性研究者の比率が高いとは言い難く、社会的にもその倍増が求められるなか、物性研は柏キャンパス内の研究機関と協力して、女子中高生向けの「未来をのぞこう!」、女子大学生・大学院生向けの「やっぱり物理が好き!」のイベントを毎年開催し、理系進学への支援、物理や物質科学分野のキャリアビルディング・女子学生のネットワーク

づくりを支援してきました。また、研究者向けイベント「ISSP WOMEN'S WEEK」では女性研究者が互いの知識や経験を共有することにより、様々な問題対処や環境改善に取り組むネットワークづくりの一助となっています(<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/fund/women-encourage/>)。本基金へのご支援によりこのような活動が継続して行われ、さらなる展開に繋がるものと期待しています。

本基金は皆様から幅広いご支援をいただきたいと考えておりますが、特に、かつて物性研で学び卒業された方や関係していた研究者の方には、是非とも後進のための援助をお願いしたいと思っております。成功を収められた方にはそれなりの、これからそうなる方にもそれなりのご協力をお願いできれば幸いです。本基金創設の目的のひとつには「物性研愛」を育てることがあります。「物性科学研究教育助成基金」および「Qナノラボ基金」では、ご寄付を賜りました方々のご芳名を物性研本館エントランスホールに新設する「周期表銘板」にて、末永く顕彰させていただきます。詳しくはホームページをご覧ください。

(<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/fund/>)

また、東大基金全体のホームページでは税法上の優遇措置や遺贈に関する情報があり、個別の相談にも応じてくれますので、併せてご確認ください。( <https://utf.u-tokyo.ac.jp> )

物性研は日本の物質科学のハブとして、今後も基礎研究の促進と物質科学の発展に寄与するとともに、未来の研究者を支えるべく着実に進んで参ります。皆様のあたたかいご支援を賜りますよう心よりお願い申し上げます。

東京大学物性研究所長 廣井 善二



「物性科学研究教育助成基金」  
—物性科学の基礎研究を促進し、  
発展を支える基盤強化のために—

<https://utf.u-tokyo.ac.jp/project/pjt182>



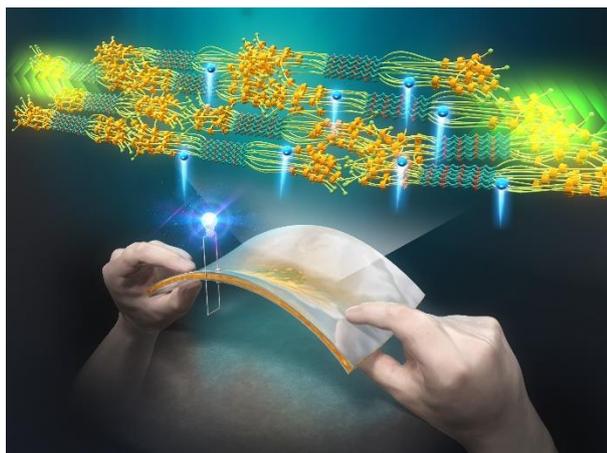


図 3. ゲル電解質を用いたフレキシブル電池のイメージ図。

### 参考文献

- [1] K. Hashimoto, T. Shiwaku, H. Aoki, H. Yokoyama, K. Mayumi, K. Ito, *Sci. Adv.*, 9, eadi8505 (2023).
- [2] C. Liu, N. Morimoto, L. Jiang, S. Kawahara, T. Noritomi, H. Yokoyama, K. Mayumi, K. Ito, *Science* 372, 1078 (2021).





と連続励起との間の相互作用を変化させて、準粒子の安定性を制御する試みはされていない。そこで我々は、磁場により相互作用を変化させ、マグノンの安定性を磁場で制御することを試みたところ、それに成功した[7]。

## 2. 研究の内容と成果

中性子非弾性散乱実験は、大強度陽子加速器施設 J-PARC 物質・生命科学実験施設 MLF の HRC 分光器、日本原子力研究開発機構研究用原子炉 JRR-3 の HER 分光器、および米国オークリッジ国立研究所の HYSPEC 分光器を用いて行われた。

図 2a-2f に、様々な磁場下で測定された量子磁性体  $\text{RbFeCl}_3$  の中性子非弾性散乱スペクトルを示す。測定温度は 0.1 K である。横軸は波数、縦軸はエネルギーである。高輝度の輝線が観測されたマグノンである。 $H = 0 \text{ T}$  では、全波数-エネルギー領域でスペクトルが観測されたが、 $h = 0.5$  の波数(図 2 $\Gamma$  点)ではややブロード(赤矢印)になっている。0 T で 1 本であったモードが 1 T でゼーマン分裂し、2 T まではモードが観測されている。しかし 3 T では、本来モードが存在するであろう 2 meV 近傍でモードは非常にブロードとなり、マグノンが不安定化していることがわかる。さらに 4 T ではブロードな強度の下に白矢印で示したシャープなモードが出現する。5 T ではより明瞭になりマグノンが安定することが分かる。このように磁場印加によってマグノンの安定性を制御することに成功した。5 T の 2 meV 近傍のモードの形状は、低磁場から推察するともう少し曲率の小さい曲線になると考えられるが、実際には曲率が大きくほぼフラットな曲線となっている。またモードは下に押し下げられているように見える。

図 1g-1l に  $\text{RbFeCl}_3$  の磁場下 2 マグノン連続励起の状態密度の計算結果を示す。ここでは 1 マグノンと 2 マグノン連続励起の相互作用は無視している。青色から黄色に着色されている領域では状態密度は有限となっており、そこではマグノン崩壊が保存則により許容されている。つまり、ほぼすべての領域で、マグノンは崩壊し得る。

黄色領域は 2 マグノン連続励起の状態密度が大きな領域を示している。図 1g の 0 T の  $\Gamma$  点近傍では、白実線で示したマグノンのモードと黄色領域が近い。このために図 1a の実験スペクトルでは、赤矢印で示されたようにマグノンがややブロードになっている。図 1g-1l において、白実線のマグノンと 2 マグノン連続励起の状態密度の極大エネルギーとの関係を見ると、磁場を印加していくと少しずつ近づいている。このため、図 1a-1d において、磁場増大に

よりマグノンが不安定化したと考えられる。

$\Gamma$  点の高エネルギー領域のマグノンと 2 マグノン連続励起の相互作用を計算し、磁場に対してプロットすると、図 3 の黒シンボルで示されるように単調増加していることが明らかになった。さらに、マグノンのエネルギーの計算値と実測値の差を、磁場に対して赤シンボルでプロットした。すると、2 T までは計算値と実測値は一致するものの、3 T 以上では実測値が計算値よりも小さくなっていることが明らかになった。このことから、2 T 以下の低磁場では、本稿 1 節で述べた相互作用が弱いケースが実現しており、 $\Gamma$  点近傍の高エネルギーマグノンは、線形スピン波理論で計算されたエネルギーで不安定化している。一方 3 T 以上では相互作用が臨界値を超え、強い相互作用のケースが実現し、マグノンのエネルギーが下に押し下げられマグノンが安定化する。このように、磁場によりマグノンと連続励起の間の相互作用が変化し、マグノンの安定性が制御されたことが分かる。

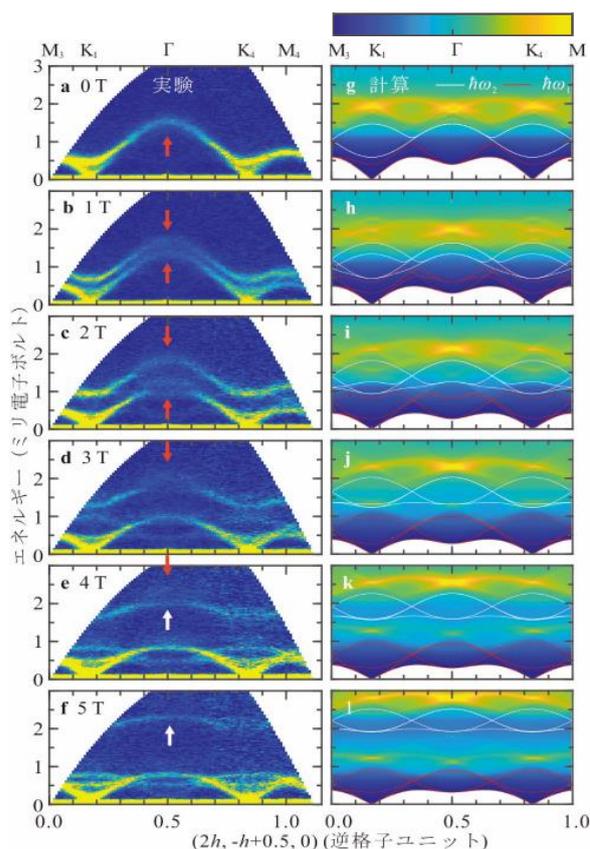


図 2 a-f, 磁場下  $\text{RbFeCl}_3$  の中性子非弾性散乱スペクトル[7]。磁場は  $c$  軸に平行に印加した。測定温度は 0.1 K。g-l, 計算された 2 マグノン状態密度。白実線と赤実線は線形スピン波理論で計算された 1 マグノンのモード。



# 音波を閉じ込めてスピン波との強結合を室温で実証 -スピン波-音波を活用した新しいデバイスへ道-

物性研究所・ナノスケール物性研究部門 大谷 義近

## 【研究の背景】

異なる二つのシステム間の相互作用は、私たちの日常生活において重要な役割を果たしている。例えば、視覚認識は視神経と光子の相互作用によって可能になり、私たちは周囲の世界を見ることができる。また、基礎研究の分野では、電子と他のシステムの相互作用を通じて、多くの物理現象を観察し、様々な物理メカニズムを理解することができる。

近年、システム間の相互作用がシステムの外部へのエネルギー散逸を上回る強い結合状態(強結合)が注目を集めている。異なるシステム間で強結合を達成できれば、それぞれのシステムの特性を併せ持つ新たな結合状態が生まれ、従来の単一システムとは異なる原理で動作するデバイスの実現が可能となる。このため、光と固体物質など、さまざまなシステム間の相互作用に関する基礎研究が活発に行われている。

我々は、スピンエレクトロニクスデバイスや音響デバイスの機能拡張につながるスピン波と音波の結合に注目した[1]。スピン波は、強磁性体中の局在電子が持つスピンの歳差運動しながら空間を伝播する波動である。このスピン波を利用することで磁気情報の伝播が可能となり、メモリデバイスなどの応用が可能となる。一方、音波は物質中の原子の振動が伝わる波で、特に表面を伝わる音波(表面音波)は長距離伝播が可能であるため、タッチパネルやガスセンサーなど広範な用途に応用されている。しかし、スピン波と表面音波の散逸が大きいと、これまで強結合状態の室温での実現は達成されていなかった。

## 【実験の概要】

本研究では、音響共振器を圧電基板上に作製し表面音波を閉じ込めることで、表面音波の散逸を低減し、スピン波と表面音波の結合について詳細に調べた。この実験では、対となる二つのくし形電極(IDT1、IDT2)を備え、二つのくし形電極の間に音響共振器を配置した(図 1b)。音響共振器の内部には、ニオブ酸リチウムの圧電基板上に磁性材料として低い磁気減衰を持つコバルト鉄ボロンの薄膜(強磁性膜)を成膜した(図 1c)。また、表面音波の周波数は、

強磁性体中のスピン波を励起可能な周波数 6.58GHz(波長 600 ナノメートル(nm、1nm は 10 億分の 1 メートル))を用いた。

くし形電極(IDT1)で励起された表面音波は、音響共振器を伝わり、対となるくし形電極(IDT2)で電気的に検出できる。スピン波と表面音波は等しい波長と周波数で結合することから、表面音波が音響共振器内部の強磁性膜を伝わることで、表面音波と同じ波長( $\lambda_p$ )と角周波数( $\omega_p$ )を持つスピン波が励起される(図 1a)。表面音波は音響共振器内に閉じ込められることで散逸が低減されるとともに、表面音波のエネルギーが強磁性膜に吸収されるため、音響共振器を透過した表面音波の信号強度を測定すれば、スピン波と表面音波の結合の大きさを評価できる。

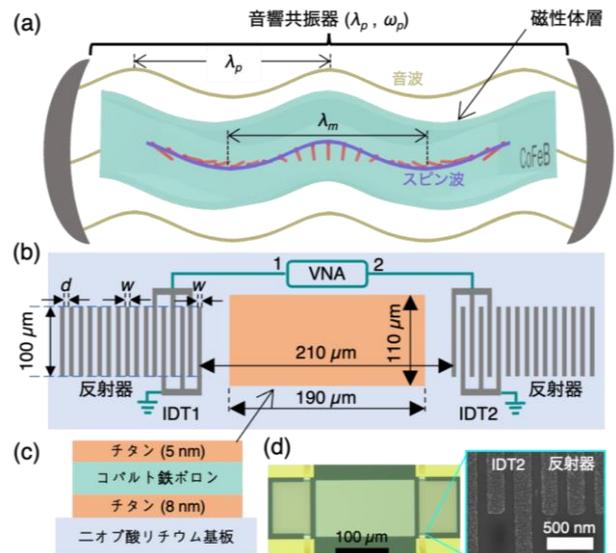


図 1 実験の模式図と試料の構造

- (a) 音響共振器内部のスピン波と表面音波の結合の概念図。
- (b) 実験に用いた試料構造の模式図。二つのくし型電極(IDT: Interdigital Transducer)、音響共振器(反射器)、強磁性膜から成る。くし形電極および反射器を構成する金属線の幅( $w = 175\text{nm}$ )と間隔( $d = 125\text{nm}$ )から表面音波の波長(周波数)を計算できる[ $\lambda_p = 2(w + d) = 600\text{nm}$ ]。二つのくし形電極を接続したネットワークアナライザ(VNA: Vector Network Analyzer)で表面音波の透過率を測定する。
- (c) 音響共振器内部の強磁性膜の膜組成。
- (d) 試料の顕微鏡像(左)と走査電子顕微鏡像(右)。



## 【まとめと今後の展開】

表面音波の研究の歴史は長く、これまでにガスの探知や電子機器のセンサー、タッチパネルなどに広く応用されている。さらに、強磁性体におけるスピン波も、磁気メモリデバイスや磁気ロジック回路などに用いられ、現代社会で必要不可欠な物理現象である。その二つを強く結ぶ強結合の室温での実現は、それぞれの波の特性を併せ持つため、磁場で制御できる表面音波センサーや、表面音波を用いた磁気メモリデバイスなど、新しい原理に基づく音響およびスピントロニクスデバイスの開発に役立つことが期待される。

## 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た。

## 参考文献

- [1] Y. Hwang, J. Puebla, K. Kondou, C. Gonzalez-Ballester, H. Isshiki, C. S. Sánchez Muñoz, L. Liao, F. Chen, W. Luo, S. Maekawa, & Y. Otani, "Strongly coupled spin waves and surface acoustic waves at room temperature", *Phys. Rev. Lett.* 132, 056704 (2024).





この相違の起源を明らかにするために、モータータンパク質の速度の負荷依存性(図3)に注目した。物質を輸送するモータータンパク質は、混み合った細胞内で粘性による負荷を受けるが、速度が負荷に対し鈍感だと速度-負荷関係は上に凸の関数になり、敏感だと下に凸の関数になる(図3)。モータータンパク質輸送モデルのシミュレーション結果から、下に凸の速度-負荷関係を用いると速度が収束せず、ワイブル型にならないことが分かった。速度が負荷に敏感だと、稀に非常に大きい速度値を発生し、極値が存在しないデータの振る舞いを見せる。つまり、輸送速度の負荷依存性として、ワイブル型に分類されるキネシンは上に凸の関数、極値を持たないダイニンは下に凸の関数であると考えられる。平均値で見ると区別がつかないキネシンとダイニンの速度データだが、平均値からの外れ値に注目する極値統計解析により、キネシンとダイニンが異なる力学特性を持っていることが分かった。

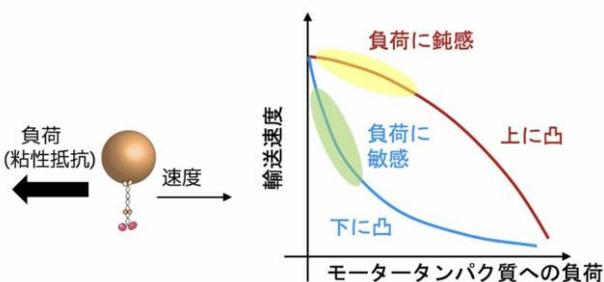


図3 モータータンパク質の速度の負荷依存性 (力学性質の一例)

これまで、モータータンパク質の速度の負荷依存性は光ピンセットを用いたガラスチャンパー内の1分子実験で調べられてきた。今回、初めて生きている個体内での力学性質を明らかにし、これまでの解析では知り得なかった速度上限の違いを、極値統計解析によって初めて得ることができた。今回の手法を応用することで、モータータンパク質本来の環境である細胞内で物理的性質を明らかにすることが可能である。モータータンパク質のアミノ酸変異が輸送速度や輸送力などの物理量の変化に繋がり、物流障害からさまざまなヒト疾患を引き起こす。特に、長い軸索があり能動輸送が重要な神経細胞では、物流障害から神経細胞死を引き起こすこともある。アルツハイマー病や筋萎縮性側索硬化症(ALS)(注4)などの神経変性疾患では、モータータンパク質の変異による物流障害が指摘されているため、今回開発した極値統計学による解析手法を用いることで、モータータンパク質の変異に起因する神経疾患の分子メカニズムの解明への寄与が期待される。

本研究は、JST さきがけ「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(課題番号: JPMJPR1877)、科研費挑戦的研究(萌芽)(課題番号: 22K18679)の支援により実施された。

(注1) 蛍光イメージング:

観察対象に蛍光物質を付け、蛍光物質を光らせることで対象を観察する顕微鏡観察法。タンパク質や分子で混み合った細胞内で、観察対象のみを観察することに適している。

(注2) ワイブル型:

極値分布はワイブル型、フレシェ型、グンベル型の3タイプの形状があり、極値が存在する分布をワイブル型と言う。

(注3) 軸索:

神経細胞から伸びる長い突起。神経細胞のシグナルを他の細胞へ伝える働きをもつ。

(注4) 筋萎縮性側索硬化症(ALS):

神経変性疾患の一つで、筋肉を動かし運動をつかさどる神経の障害。難病に指定されている。

## 参考文献

T. Naoi, Y. Kagawa, K. Nagino, S. Niwa, K. Hayashi. Extreme-Value Analysis of Intracellular Cargo Transport by Motor Proteins. *Communications Physics* **7**, Article number 50 (2024).



# 日米先端工学シンポジウム Most Interactive Presenter's Award を受賞して

機能物性研究グループ 林 久美子

この度、2023 年日米先端工学シンポジウム(JAFOE) (2023年7月18日~20日、早稲田大学)[1]のMost Interactive Presenter's Award を受賞しました。この賞は日本工学アカデミー、全米工学アカデミー、科学技術振興機構(JST)が共催する 2023 年日米先端工学シンポジウム(JAFOE)において日米研究交流に最も貢献した参加者に日本工学アカデミーから授与されるものです。なお、JAFOE には以下の特色があります。

- 異なる4分野の発表・討議すべてに全参加者が出席する異分野交流の場
- 厳選された若手研究者のみにより、制約のない自由活発な討議
- 企画・運営も若手研究者によって行なわれる
- 発表者・討議者は企画・運営に携わる若手研究者と EAJ などが選出

また、以下に示すように JAFOE は歴史のある取り組みとして発展してきました[2]。

- 1995 年以来、全米工学アカデミーが若手研究者間の議論の場として FOE(Frontiers of Engineering)を開催
- 国際的な規模に広げ、1998 年、独米間で二国間シンポジウムを発足
- 日米両国間で同様なシンポジウムを行う提案があり、JST が主体となり、日本工学アカデミーがこれに協力する形で、2000 年 11 月に日本で第 1 回が開催
- 第 2 回は 2002 年に日本で行われ、以後は毎年米国と日本で交互に開催
- 2009 年に米国で第 9 回を実施。これを機に、日本側運営主体は、JST から日本工学アカデミーに代わり、JST は引き続き本事業を資金的側面から支援
- FOE は世界的にも注目される若手育成プログラムとなり、米国内およびドイツ、日本との実施に加え、中国、インド、EU、ブラジルなどとも行うことが決定

JAFOE 2023 では日米両国から選抜された若手研究者(30~45 歳程度)30 名ずつ(総勢 60 名程度)が最先端工学分野の 4 つのテーマについて発表・討議を行ないました。会議前夜の 7 月 17 日、日米参加者の顔合わせを行うため

に宿泊先のリーガロイヤルホテル東京で Welcome Reception が開催され、私も参加しました(写真左)。18 日朝から小林喜光会長のビデオ挨拶、Dr. Al Romig(米国工学アカデミーの Executive Officer)、菱田公一会長代理、小林治 JST 国際部長の挨拶があり、所千晴(早稲田大学教授)運営委員長と Christopher Schuh(当時 MIT 教授)運営委員長の司会のもと会議が始まりました。討議が行われた 4 つのテーマは以下のものとなります。

- Materials by Design(沼田圭司運営委員(京都大学))
- Computational Approaches to Address Infectious Diseases(夏目やよい運営委員(医薬基盤・健康・栄養研究所))
- The Arduous and Exciting Path to the Development of Successful Mobility Exoskeletons(宮寄哲郎運営委員(東京大学))
- Circular Economy(天沢逸里運営委員(東京大学))

また、参加者が発表するポスターセッションがあり、私は「Cargo delivery in neurons, and synaptic formation simulator」のタイトルでポスター発表を行いました。夜には伊藤公平慶應義塾大学塾長にイブニングトーク(レクチャー)、19 日にはエクスカッションとして産業技術総合研究所(産総研)AI センター、日本科学未来館を見学、未来館の浅川智恵子館長の御講演など、単なる研究会の枠を超えた異分野交流の密度の濃い会議でした。エクスカッションの AI センターで見た実験作業ロボット「まほろ」、未来館で見た視覚障害者の移動を支援する自律型ナビゲーションロボット「AI スーツケース」などの次世代技術は間近で見て感銘を受けました。Dinner で話した Skip Innovation(Google X からの独立、スマーティパンツなどの歩行支援ウェアラブル端末)[3]の Kathryn Zealand 氏からも、世界で活躍する新しい女性像として、刺激を受けました。

3 日間を通じて積極的な討論への参加を行い、発表内容に対する理解を深めるとともに、参加者や関係者間の相互理解と連携強化に貢献したことが評価され、この度の受賞につながりました(写真右)。今後も、国際交流に積極的に貢献していく所存です。



# 「テラヘルツ科学の最先端 X」 優秀学生発表賞を受賞して

極限コヒーレント光科学研究センター 松永研究室 修士課程2年 小川 宏太郎

2023年12月21・22日に開催されたシンポジウム「テラヘルツ科学の最先端 X」において、優秀学生発表賞を受賞する栄誉に与りました。発表に対して賞を頂くのは初めてですので、大変光栄に思っております。

受賞の対象となった発表は、「2色逆回り円偏光マルチテラヘルツパルス発生技術の開発」です。以下で発表内容について少しご説明させていただきます。光の偏光制御技術は近年ますます発達しており、円偏光や光渦などのカイラルな光を利用して新奇物性を発現させる研究が盛んに行われています。さらにここ数年、2色の互いに逆回りの円偏光を重ね合わせることで生じる特異な回転対称性を持った光電場軌跡を使って固体を動的に制御する理論提案が相次いで報告されています。2色逆回り円偏光を使えば、系の時間反転対称性を破りながら空間反転対称性や回転対称性を制御できるため、3次元ディラック半金属のフロッケ・エンジニアリングや層状物質におけるバレー分極制御などへの応用が期待されています。

2色逆回り円偏光を物性制御の実験に適用するには、不要なバンド間励起や電子散乱を避けて瞬間的に大きなベクトルポテンシャルを与えるという点で、周波数が10-70 THz (4-30  $\mu\text{m}$ )に相当するマルチテラヘルツ帯の光が最適です。しかし、この領域は多くの物質においてフォノンの吸収帯であることから市販の光学素子を使った広帯域な位相変調が難しいため、この領域での2色逆回り円偏光の発生は報告されていませんでした。もう一つの問題として、従来近赤外や可視域のガス分子への応用とは異なり、固体への応用の場合は2色逆回り円偏光の電場軌跡の成す角度の制御が必要不可欠ですが、従来の発生方法では固体への応用に必要な精度での相対位相の制御が困難でした。

そこで、本研究では近赤外パルスから周波数変換して直接マルチテラヘルツ2色逆回り円偏光を発生させる手法を開発しました。この手法の根幹は、波長変換に用いたGaSe結晶の光学面が持つ3回回転対称性に由来する差周波発生の特長を利用したものです。入射する近赤外光の円偏光度を制御することで、差周波光の発生を禁則にしたり円偏光度を調整したりすることができます。この禁則を活用することで、周波数ごとに位相と偏光が制御された広帯域近赤

外パルスから直接所望のパルスを発生させることに成功しました。また、この発生手法では単一のパルスから発生させるため、周波数間のジッターが極めて小さく、相対位相が安定であることが分かりました。

さらに、本手法では近赤外光の位相と偏光の制御は空間光変調器によってソフトウェア上で制御できるため、2色の強度比や電場軌跡のなす向き、回転対称性やヘリシティなどの2色逆回り円偏光の持つパラメータをプログラム的に制御することも実証しました。そのため、今回開発した光源は光学素子の交換なしに照射したい物質とその目的に合わせて光電場軌跡の様々なパラメータを変えることが可能です。これは固体の空間反転対称性や回転対称性までも制御しうる新たな光源であり、固体のトポロジー制御への応用を切り開く成果であると言えます。

本研究は神田夏輝元助教(現理化学研究所・ISSPリサーチフェロー)、室谷悠太助教、松永隆佑准教授のご協力のもとで行われたものです。特に神田氏のお力添えがあってこそ、このような場所に到達できたものと思っております。この場を借りて感謝を申し上げます。





# International Symposium on Quantum Electronics 2024 「Award of Excellence in the poster presentation」を受賞して

凝縮系物性研究部門 山下研究室 博士課程 2年 吉田 大希

この度、2024年2月13日から16日まで東京大学伊藤国際学術研究センターで開催された International Symposium on Quantum Electronics 2024 において、「Award of Excellence in the Poster Presentation」を受賞しました。この賞は、シンポジウムにおいて優れたポスター講演を行った発表者を表彰するもので、トランススケール量子科学国際連携研究機構から授与されました。このような荣誉ある賞をいただき、大変光栄に思います。受賞した研究の発表タイトルは「Thermal Hall measurements to detect spontaneous thermal Hall effect in kagome superconductor  $\text{CsV}_3\text{Sb}_5$ 」です。以下、その研究内容を簡単にご紹介いたします。

時間反転対称性を破るカイラル超伝導は、表面やエッジにマヨラナ粒子が現れるトポロジカル超伝導の一種であり、環境ノイズに耐性のある量子計算への応用が期待されています。しかし、これまでカイラル超伝導を実験的に検証する方法は確立されておらず、理論的にはゼロ磁場下での自発的熱ホール効果の観測が提案されていましたが [1]、具体的な観測例は報告されていませんでした。今回、自発的熱ホール効果の検出方法を新たに提案し、カゴメ格子超伝導体  $\text{CsV}_3\text{Sb}_5$  を対象に実験を行いました。本物質を含む  $\text{AV}_3\text{Sb}_5$  ( $A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ ) 物質群では、超伝導転移よりも高温で確認される電荷密度波秩序(CDW)に関連して時間反転対称性の破れが報告されており [2-4]、その特異な CDW 相から現れる超伝導状態としてカイラル超伝導の可能性が指摘されています [5,6]。提案した測定手法による実験の結果、カゴメ格子超伝導体  $\text{CsV}_3\text{Sb}_5$  はゼロ磁場下で有限の熱ホール伝導率を示し、自発的な熱ホール効果の観測に成功しました。また、対照実験として実施した第 II 種従来型超伝導体  $2\text{H-NbS}_2$  でのゼロ信号の確認にも成功しました。これらの成果は、 $\text{CsV}_3\text{Sb}_5$  の超伝導状態の特異性を示すだけでなく、将来的に他のカイラル超伝導候補物質の検証に繋がること期待されます。

最後に、日頃からご指導いただいている山下稯准教授、武田晃助教をはじめとする研究室の皆様、そして試料提供を行ってくださった UC Santa Barbara の Wilson Group を含む全ての共同研究者の皆様に、この場をお借りして心

より感謝申し上げます。この受賞を励みに、さらなる研究に邁進してまいります。

- [1] N. Yoshioka, Y. Imai, and M. Sigrist, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 124602 (2018).
- [2] C. Mielke *et al.*, *Nature* **602**, 245 (2022).
- [3] Y. Xu *et al.*, *Nat. Phys.* **18**, 1470 (2022).
- [4] C. Guo *et al.*, *Nature* **611**, 461 (2022).
- [5] X. Wu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 177001 (2021).
- [6] R. Gupta *et al.*, *Commun Phys* **5**, 1 (2022).





# ISSP 学術奨励賞を受賞して

現・株式会社 Preferred Networks リサーチャー  
元・杉野研究室 博士課程 永井 瞭

この度、物性研究所所長賞という名誉ある賞を賜り、大変光栄に感じております。受賞の対象となったテーマは、私が大学院生時代を通して研究し続けてきた「密度汎関数理論の機械学習による構築」というものです。受賞に至るほどの成果を上げられたのは、ひとえに物性研での大学院生生活が恵まれているおかげでした。スパコン等の計算資源はとても潤沢でしたし、海外研究留学にも物性研のプログラムで行くことができました。また、議論したいときにいつでも応じてくれる教職員に囲まれていたことがありがたかったです。密度汎関数理論にまつわる技術は多岐にわたっており、少し文献を読んだだけでは分野の全体を把握できないものです。私も習いはじめた頃にはわからないことが多すぎてよく壁にぶつかっていたのですが、すぐにその道のベテランの方々からの的確に必要なことを教えてもらい、おかげで道が開けたことが何度もありました。また、柏自体がのんびりした場所ですし、理論系の研究室でもどっしり腰を据えて研究に望む雰囲気は全体的にあったおかげで、大規模な研究に集中して打ち込むことがしやすい環境でもあり、これもまた自分に合っていたと思います。こういった要素は慣れてしまうと当たり前と感じてしまうものですが、他の機関の現状を聞くに決して当たり前とは限らないことを知り、大変恵まれていたと感じました。この環境を維持・向上するために日頃から努力して下さっている物性研の皆様には感謝が尽きません。

受賞内容の研究について簡単に紹介します。密度汎関数理論とは、物質中の電子状態を求めることができる理論で、その計算精度とコストのバランスから実用的な物性計算に幅広く用いられています。しかし、その理論には不完全な部分があり、そのせいで物性計算に致命的な(定性的な評価を誤ってしまうような)誤差が乗ることがあります。その不完全を機械学習という情報理論分野から現れた技術を使って埋めることが、私の研究テーマです。機械学習というと今でこそ多くの分野に浸透した技術ですが、私が手を付け始めた頃は物理学や物質シミュレーションへの応用という点では黎明期でした。その中で、機械学習を組み合わせ

せることで密度汎関数理論を系統的に精度改善することができるフレームワークを示したことで、多くの研究者グループから反響を頂くに至りました[1-3]。今回、そういった私の研究活動を身近なコミュニティから評価していただいたことでとても嬉しく思っています。

実は、私は願望として「密度汎関数理論などの第一原理計算技術の基礎理論・技術を新たに研究しようとする大学院生・研究者が増えてほしい」と常日頃から考えています。日本では第一原理計算の結果を使った物性評価の研究は盛んですが、その第一原理計算自体の性能向上をおこなっている人はそこまで多くない印象です。第一原理計算の開発が盛んだった時代がかつてあったのですが、その時期に一気に理論や技術が高度化しすぎて、傍目からはすでに固まった技術に見えてしまっているのが現状だと思います。そのため、ある程度の期間で成果を出さなければならない大学院生などからは敬遠される傾向にあるのだと思っています。そういった面は確かにあるのですが、実際にはこの分野にはまだまだ改良すべき点が多くあり、より多くの方がこの分野に携わることで今後解決されていくのではないかと期待しています。私自身、抽象性の高い理論や数値技術の改良が、現実世界の具体的な物質の計算精度改善につながる楽しさがあるこの分野が好きで、より多くの人にこの楽しみを共有したいという願望もあります。今回の受賞がきっかけで、計算の基礎理論改善にもまだやれることがあるということを知って貰えるきっかけになればいいと思います。

今現在は民間企業で物質科学関連のシミュレーション手法の研究開発を行っております。アカデミアとは異なる環境ですが、相変わらず新しい技術を追い求める仕事も行っております。再び物性研の皆様に興味を持ってもらえる計算技術を提案できるよう、今後も努力していきたいと思っております。

- [1] R. Nagai, R. Akashi and O. Sugino, “Completing density functional theory by machine learning hidden messages from molecules”, *npj Comput. Mater.* **6**, 43(2020).
- [2] Y. Suzuki, R. Nagai, and J. Haruyama, “Machine learning exchange-correlation potential in time-dependent density-functional theory”, *Phys. Rev. A*, **101**, 050501, (2020).
- [3] R. Nagai, R. Akashi and O. Sugino, “Machine-learning-based exchange correlation functional with physical asymptotic constraints”, *Phys. Rev. Res*, **4**, 013106 (2022).

# 本多記念研究奨励賞を受賞して

凝縮系物性研究部門 井手上 敏也

この度、公益財団法人・本多記念会の第45回本多記念研究奨励賞を受賞致しました。本賞は、鉄鋼及び金属に関する冶金学・材料物性学の研究に従事した本多光太郎氏に由来する賞で、理工学、特に金属及びその周辺材料に関する研究を行い、優れた研究成果または発明を行った若手研究者を奨励するために贈られます。今回の受賞は文献[1]～[5]を始めとした研究成果が評価されたものです。この場を借りて、共同研究者である岩佐義宏氏、十倉好紀氏、永長直人氏、濱本敬大氏、越川翔太氏、江澤雅彦氏、清水直氏、金子良夫氏、Feng Qin 氏、Wu Shi 氏、吉田将郎氏、Alla Zak 氏、Reshef Tenne 氏、喜々津智郁氏、井ノ上大嗣氏、橋爪大輔氏、板橋勇輝氏、斎藤優氏、大内拓氏、野島勉氏、星野晋太郎氏、後藤千裕氏、並木宏允氏、笹川崇男氏、赤松孝俊氏、Ling Zhou 氏、Yu Dong 氏、北村想太氏、吉井真央氏、Dongyang Yang 氏、恩河大氏、中川裕治氏、渡邊賢司氏、谷口尚氏、Joseph Laurienzo 氏、Junwei Huang 氏、Ziliang Ye 氏、森本高裕氏、Hongtao Yuan 氏、およびその他すべての関係者の皆様に感謝申し上げます。

受賞対象となった研究は「ナノ物質の対称性制御と量子力学的整流現象の開拓」です。原子層物質をはじめとするナノ物質は、薄膜化やナノチューブ、界面作製といった手法を用いることで結晶対称性を制御したり、元の結晶にはないユニークな構造を実現したりすることができます。私はこれまで、そのようなナノ物質において発現する対称性の破れを反映した物性や機能性の研究を推進してきました。特に、ナノ物質における対称性の破れを反映した物質固有の(単一物質で生じるような)整流現象である、非相反伝導(結晶対称性を反映した電流や超伝導電流の整流現象)および光起電力効果(分極を反映した光電流現象)の開拓を行い、その微視的機構(スピンや超伝導ボルテックス、波動関数の幾何学的性質との関係性)を明らかにしてきました。今回、それら一連の成果が評価されたということで、大変嬉しく思います。

均質な固体中における対称性の破れを反映した整流現象は、私が研究を開始する前から様々な先駆的研究がなされてきましたが、最近では固体中の量子状態を知る新しい手

法として多くの方の注目を集めており、様々な関連分野(スピントロニクスや磁性、超伝導、トポロジカル物性、光物性、ナノエレクトロニクス、量子多体物性等々)に刺激を与えながら発展してきています。また、量子力学的整流現象は、固体中の電荷やその他様々な量子自由度を自在に制御する上で極めて有望な機能であり、将来的に省エネルギーエレクトロニクスデバイスや新規発電手法の確立へと繋がる可能性があります。私がこの研究を始めた当初は、このテーマがこれほどまで大きな広がりを持つとは想像もしていませんでした。その発展に微力ながら貢献できたことは、大変幸運であったと感じています。

このように、自分の研究と関連するトピックスが、時には自身の想像をはるかに超えて発展していくのを目の当たりにできるのが、研究の醍醐味の一つではないかと思えます。私が取り組んでいる原子層物質の研究の歴史を振り返ってみても、想像もしなかったようなテクニックやアイデア、概念、現象が見出されて分野を大きく発展させたり新しいトレンドが生まれてきたりしました。物性研究所に着任して以降、私自身も研究室メンバーと少しずつですが、新しいことに挑戦しています。今回の受賞を励みに、今後そのような想定外のテーマに出会えることを楽しみにしつつ、研究に励んでいきたいと思えます。



- [1] T. Ideue *et al.*, “Bulk rectification effect in a polar semiconductor” *Nature Physics* **13**, 578 (2017).
- [2] F. Qin *et al.*, “Superconductivity in a chiral nanotube” *Nature Communications* **8**, 14465 (2017).
- [3] Y. M. Itahashi *et al.*, “Nonreciprocal transport in gate-induced polar superconductor SrTiO<sub>3</sub>” *Science Advances* **6**, eaay9120 (2020).
- [4] T. Akamatsu *et al.*, “A van der Waals interface that creates in-plane polarization and a spontaneous photovoltaic effect” *Science* **372**, 68 (2021).
- [5] Y. M. Itahashi *et al.*, “Giant second harmonic transport under time-reversal symmetry in a trigonal superconductor” *Nature Communications* **13**, 1659 (2022).

# Winning the Award of Excellence in the poster presentation in TSQS2024

Junhyeok Jeong, M2, Kondo Laboratory

The TSQS2024, or in other words, the International Symposium on Quantum Electronics is an annual international workshop hosted by the Trans-Scale Quantum Science Institute (TSQS). This workshop aims to foster innovation by bridging a wide spectrum of quantum science disciplines. This year, the symposium was held from February 13 to 16 at the Ito International Research Center at the University of Tokyo. This program includes both an oral and a poster presentation session, and each participant can give their talk in either way. The program committees evaluate how the poster and the research are innovative and well-explained to other participants. And present an award to some selected participants.

It was my first time joining the international workshop, and also it was my first time presenting a poster to audiences. Even though I was quite nervous until just before the presentation day, I could enjoy the atmosphere of the hall, the talk, and everything in there. Also, it is a great honor to be selected as one of the award winners.

Quantum Electronics, which seems to be a little vague nomenclature, covers large research fields including transport, magnetism, or even cosmologies. My research was on the high- $T_c$  superconductors. A superconductor is an exotic material that shows zero resistivity under a critical temperature ( $T_c$ ). This fascinating property can be applied to ways, such as ultrahigh-efficiency electric transport or Magnetic Resonance Imaging (MRI), so there have been huge efforts to find high- $T_c$  superconductors and the copper-based superconductor (Cuprate) is one of the highest- $T_c$  materials so far in the field, but nobody knows how the high- $T_c$  is achieved in cuprate.



Figure 1. Me holding the award of excellence in the poster presentation.

The most studied cuprates so far are so-called ‘single layer’ or ‘bilayer’ which means there is one or two  $\text{CuO}_2$  planes where the superconductivity emerges imbedded between the dopant layers. However, my study aimed to the ‘multilayered’ cuprate which has multiple (more than three)  $\text{CuO}_2$  layers inside one unit cell. This multilayer cuprate includes a ‘clean’ innermost  $\text{CuO}_2$  plane, which is well protected from the spatial inhomogeneity that inevitably comes from the dopant layer by the other  $\text{CuO}_2$  planes (Figure 2. a). It means that the innermost  $\text{CuO}_2$  plane remains structurally flat and electronically homogeneous hence it is suitable for studying the intrinsic physics of the cuprate.

The intriguing feature of the innermost clean  $\text{CuO}_2$  plane is that the superconductivity coexists with the antiferromagnetic order. It had been clearly revealed by the study of a five-layer system. However, the observed superconducting pairing gap in the five-layer system was rather small, an order of a few meV. Hence I focused the four-layer system, which may possess a slightly increased doping level than the five-layer system.

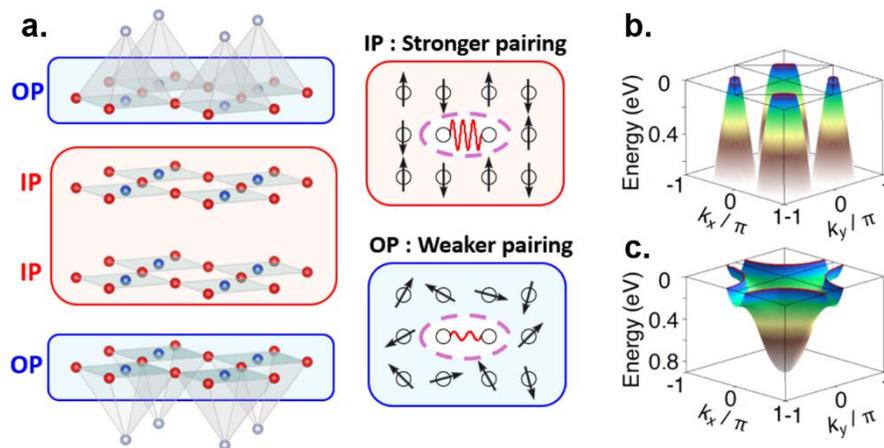


The measured superconducting gap in the four-layer system was around 15 meV to 30 meV within a very tiny doping level difference. This pairing gap is actually 3 to 6 times larger than that of the five-layer system, suggesting that the superconducting pair can stay strong even under the presence of the antiferromagnetic order. Moreover, since the electronic band topology of the ‘small’ Fermi pocket is quite different from the conventional single- and bilayer systems, it is possible to discuss about the pairing strength, which is a physical parameter indicating how the superconducting pairs formed strongly (*Figure 2. b, c*).

The pairing strength is calculated by the ratio of the superconducting gap ( $\Delta$ ) and the Fermi energy ( $\epsilon_F$ ).

The observed pairing strength in the four-layer system was indeed extremely large, around 0.69 at maximum. This result suggests that the strong superconducting pair exists in a clean- and underdoped inner plane and will pave the way to investigate a high- $T_c$  mechanism of cuprates.

About this result, I want to thank all the co-authors of the work. Without them, I would not be able to get a fruitful result and the award. Especially, I want to take a moment to express my sincere gratitude to Prof. Takeshi Kondo, as my academic supervisor, and also I am very thankful to Dr. Soonsang Huh, Dr. Kifu Kurokawa, and Mr. Yuyang Dong for the insightful discussion.



**Figure 2.** (a)The crystal structure of a four-layer system. The inner plane (IP) is well protected by the outer planes (OP), and hence remains clean and homogeneous. (b)The electronic band topology of IP, which shows a small pocket at a Fermi energy. The band top (or Fermi energy) is rather small, an order of few tens of meV. (c)Same with (b) but of OP. This band topology was seen in many conventional cuprates.

# JSR2024 学生発表賞を受賞して

極限コヒーレント光科学研究センター  
木村研究室 D2 櫻井 快

このたび 2024 年 1 月 10 日～12 日にかけて開催された第 37 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムにて JSR2024 学生発表賞を受賞いたしました。多くの発表の中から受賞に選ばれたことに大変光栄に思います。この場を借りて研究にご協力いただいた皆様に感謝いたします。

このたび受賞対象となった研究は、同学会にて発表した「細胞の軟 X 線 XAFS タイコグラフィ計測と主成分分析によるスペクトル解析」という手法開発の研究であり、原理や実験内容について簡潔に紹介します。

計測の観点から見た細胞は多種多様な物質が空間的に複雑に分布する試料であり、細胞内部構造の詳細な計測は生物学、医学、薬学など、多岐に渡る応用が考えられます。これらの応用を実現させるには、細胞内部の「高分解能な」、「非破壊的な」、「化学状態計測」が有効ですが、現在主流である可視光顕微鏡や電子顕微鏡では様々な制約がありました。

本研究で使用する軟 X 線 XAFS タイコグラフィという手法は、数 10 nm の高分解能での化学状態計測を非破壊的に実行可能という細胞計測に適した特徴を持つ手法です。

一般にコヒーレント X 線を試料に照射すると、透過後の X 線は試料構造を反映した回折パターンを形成します。試料上の複数箇所での回折パターンを計測し、それら全てに矛盾しないように吸収像を最適化していく方法をタイコグラフィ[1]と呼びます。更に、軟 X 線吸収スペクトルの特定の波長領域には化学状態を強く反映する微細構造(XAFS)が含まれています[2]。そのため XAFS 近傍の波長領域でタイコグラフィを繰り返し、XAFS の空間分布を見ることが化学状態の空間分布を推定することができます。

軟 X 線 XAFS タイコグラフィには高輝度のコヒーレント軟 X 線光源が必要であり、兵庫県の大規模放射光施設 SPring-8 の軟 X 線ビームライン BL07LSU[3]を利用しました。今回は細胞試料として、化学固定した神経細胞を物性研究所井上研究室に提供いただきました。タイコグラフィに使用した光子エネルギーは XAFS の近傍である 395 eV – 425 eV(窒素吸収端)と 520 eV – 570 eV(酸素吸

収端)の合計 209 点です。SPring-8 での実験後、吸収像の再構成と画像処理を経て、XAFS の空間分布を構成しました

XAFS の空間分布というデータは非常に巨大であり、そのままでは考察が困難です。そのため主成分分析を適用し、XAFS の特徴抽出と、特徴毎の空間分布を調べました。抽出した特徴は細胞内で特定の構造を反映した分布を持っており、構造生物学の観点から対応する小器官の推定を行ったところ、小器官が多く含有する生体物質と、XAFS の特徴から推定される生体物質の傾向が合致していることが分かりました。

この結果は本手法が細胞内での生体物質分布の高分解能計測に適用可能な可能性を示すものであり、将来的には生細胞内での薬物動態の直接観察など、創薬分野への活用を期待しています。

- [1] J. M. Rodenburg, et.al., Ultramicroscopy, 107, 227-231, (2007).
- [2] S. Mitra-Kirtley, et.al., J. Am. Chem. Soc., 115, 252-258, (1993).
- [3] Y. Senba, et.al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A, 649, 58-60, (2011).

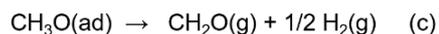
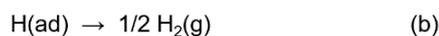
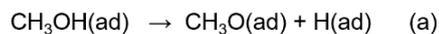


# 日本物理学会 領域9 学生優秀発表賞を受賞して

ナノスケール物性研究部門 吉信研究室 博士課程1年 阪口 佳子

去る2024年3月、オンラインで行われた日本物理学会2024年春季大会にて学生優秀発表賞(領域9)を受賞する栄誉に恵まれました。この賞は、学会において優れた講演発表を行った学生に対して授与されるもので、研究内容と発表の両面が審査されます。受賞対象は「Cu(977)およびPd/Cu(977)表面におけるメタノールの脱水素化反応」です。以下、研究内容についてご紹介いたします。

メタノールは様々な物質の原料となる有用な化学物質であり、また、その年間生産量の30%以上はホルムアルデヒドへ変換されます[1]。メタノールの合成や改質反応には触媒としてCuが用いられることから、Cu表面におけるメタノールの表面化学過程はよく研究されています[2]。Cuの低指数面ではメタノールの脱水素化はほとんど進行しないため[3]、本研究では、活性サイトとしてステップを持つCu(977)表面およびPdを少量蒸着して単原子合金化したPd/Cu(977)表面を調製して、メタノールの吸着・脱離・反応過程について、昇温脱離質量分析(TPD)、赤外反射吸収分光(IRAS)、および放射光による高分解能X線光電子分光(HR-XPS)により分析しました。メタノールを吸着させたCu(977)とPd/Cu(977)表面のTPD測定により、それぞれ特定温度でのホルムアルデヒドの脱離を観測しました。これにより、Cu表面のステップサイトも、Cu基板表面のPd単原子サイトも、ともにホルムアルデヒド生成を促進する効果があることがわかりました。また、水素分子の脱離ピークは二つの温度で観測され、それらの面積強度が1:1でした。また、IRAS測定により、反応中間体がメトキシ種であるとわかりました。以上のことから、これらの表面でのメタノールの脱水素化は式(a)-(c)のように進むと考えました。(b)と(c)で生じた水素の量が1:1であったことから、生成されたメトキシ種のほぼ100%がホルムアルデヒドになることを明らかにしました。また、Pd/Cu(977)とCu(977)表面におけるIRAS測定の結果から、メトキシ生成過程(式(a))はPdにより促進されていることがわかりました。さらに、メトキシの吸着したPd/Cu(977)表面でXPS測定を行った結果、Pd3d<sub>5/2</sub>のピークのシフトが確認されたことから、Pdサイト周辺にメトキシ種が吸着している可能性が示唆されました。



TPD測定の結果から、CuのステップサイトとPdサイトはメタノールの分解によるホルムアルデヒド生成反応の活性化障壁を低下させることがわかりました(図1)。これは、逆反応であるCO<sub>2</sub>の水素化によるメタノール合成反応の最終過程についてもこれらのサイトが活性化障壁を低下させるということを意味します。つまり、本研究で得られた結果はCO<sub>2</sub>の水素化によるメタノール合成反応のメカニズム解明に対しても意味を持つものです。

本発表にあたり、指導教員の吉信淳教授をはじめ、多くの方々にお世話になりました。この場をお借りして感謝申し上げます。

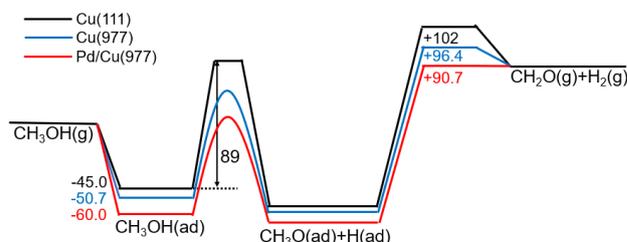


図1 3つのモデル触媒表面におけるメタノール⇄ホルムアルデヒドのエネルギーダイアグラム(単位: kJ/mol)

## 参考文献

- [1] M. I. Malik, et al., *Catalysts*, **11** (2021)893.
- [2] J. Niu et al., *International Journal of Hydrogen Energy*, **47**, 15 (2022) 9183-9200.
- [3] J. N. Russel Jr. et al., *Surface Science*, **163** (1985) 516-540.

# 外国人客員所員を経験して

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

Measurements under extreme conditions - high pressure, low temperature, intense magnetic fields - often give rise to new discoveries in solid state physics and other scientific domains. Research infrastructures all over the world therefore make substantial efforts to push these conditions to unprecedented limits, while trying to cope with the inevitable side-effect of an increasingly harsh experimental environment. With its outstanding facilities, the Institute for Solid State Physics is an international reference for measurements under extreme conditions. This notably includes the highest indoor magnetic fields in the world, produced by Prof. Matsuda's group in the International Megagauss Science Laboratory (IMGSL)

Research in high magnetic fields is also the principal activity of my home institution, the Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses (LNCMI) in Toulouse, France, and its partners of the European Magnetic Field Laboratory (EMFL). Apart from Kashiwa, Toulouse is currently the only other place in the world where magnetic fields above 100 T are routinely used for scientific experiments. As such fields can only be produced on a microsecond timescale using high-voltage pulsed-power equipment, researchers in either facility are facing a common problem: to conceive measurement techniques with adequate acquisition speed and sufficient protection against transient electromagnetic disturbances. Given the number of potentially interesting techniques this represents a vast and ambitious endeavor.

Experimental development is often exciting, sometimes frustrating and always very time-consuming. It often depends on the right inspiration, and what could be more

inspiring than to discuss and work side-by-side with colleagues interested in the same domain? I have therefore been extremely elated when, several years back, Prof. Matsuda proposed me to visit his lab more regularly in order to intensify our existing collaboration and jointly promote the technical progress and use of Megagauss fields. After a first 6-month stay in 2022 I thus found myself again in Kashiwa for two 1-month stays in mid-November 2023 and mid-February 2024. The stifling heat and mistiness of the 2022 summer months was this time replaced by Koyo, my favorite season in Japan, and a cold winter month with clear views of Fuji-san. By comparison, the atmosphere in the lab was as always: companionable and most inspiring!

My work was this time dominated by a scientific project, optical measurements on 2-dimensional organic-inorganic perovskites, and I am grateful for the additional machine time I was given at the end of my stay in order to be able to finish the experiments. Of course, this would still not have been possible without Dr. Zhou's help and that of 2 old acquaintances, Prof. Miyata and Dr. Yang, who respectively stayed in Toulouse for their postdoc and PhD roughly 10 years ago. Working with them was an immense pleasure and I apologize for breaking their replaceable cryostats rather than building (and breaking) my own.

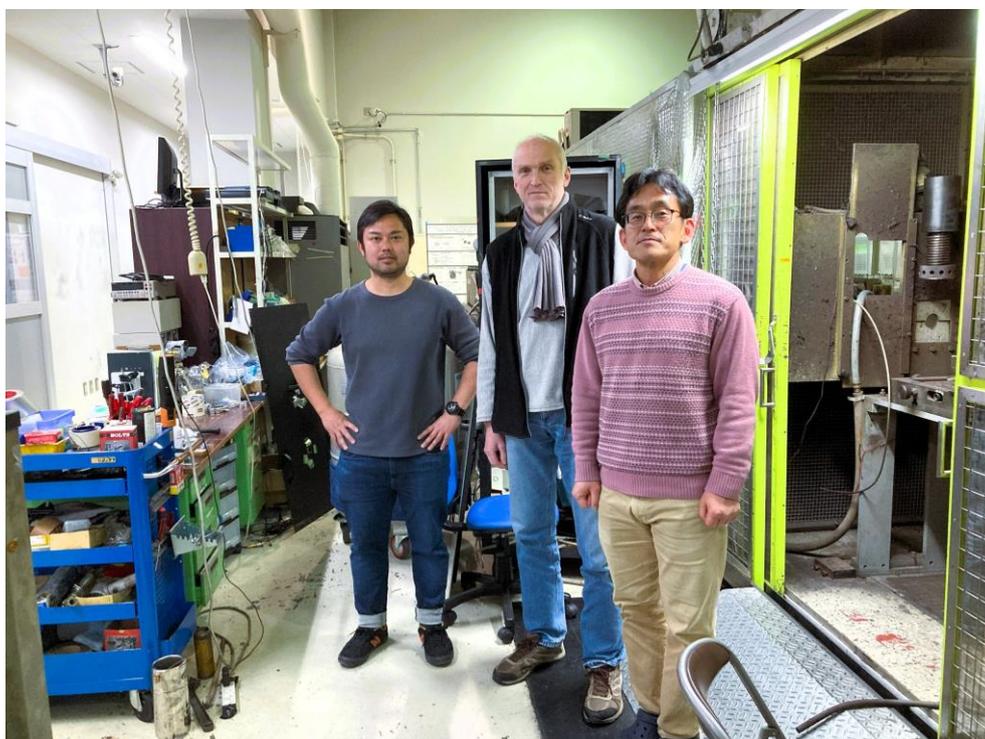
Apart from scientific-technical work, my stay also provided a good occasion to plan ahead as far as our collaboration is concerned. As of 2024 the project will dispose of a yearly travel budget provided by Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) in the framework of an International Research Project (IRP). The decision how to spend this budget in the first year

was quickly taken: a small bilateral workshop on Science and Instrumentation for Extreme Magnetic Fields (6MaF) organized by Prof. Matsuda and myself in Toulouse will permit other members of the 2 groups to get acquainted. It will put the collaboration on a broader basis and notably motivate students and younger staff to interact and play a more active role.

In view of the scientific-technical results I could obtain at IMGSL, the deepening of our collaboration and the good time I had in the Tokyo area, I consider my stay as extremely fruitful and enjoyable. This would not have been possible without the ISSP's generous and perfectly well organized international visiting professors program and the help of local staff for which I am sincerely grateful. My thanks go of course first of all to Prof. Matsuda for inviting me and taking care of me during my

different stays. It is hard to imagine a better host. I am equally indebted to Prof. Miyata, Drs. Zhou and Yang as well as all other IMGSL members for the warm welcome in their lab, good discussions and help whenever and wherever I needed it. Last but not least, I would like to thank Mrs. Ishiguchi, Mrs. Sugimoto and all other ISSP staff involved in my stay for their untiring support with administrative and everyday matters that made my life in Kashiwa simple and enjoyable. I always felt perfectly accompanied, both during my stay and the preceding preparation phase.

At present, I am looking forward to a continued collaboration with more exciting discussions and experiments both in Kashiwa and Toulouse. I am sure to be back soon ...



# 外国人客員所員を経験して

**Christophe Marcenat**

**Interdisciplinary Research Institute of Grenoble (IRIG)  
Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA), France**

I had the great privilege of being welcomed as a visiting professor for 2 months at the Megagauss Laboratory of ISSP. This stay is part of a long-term collaboration with Prof. Y. Kohama to develop and improve experimental techniques for measuring the thermal properties of quantum materials in intense magnetic fields, both in pulsed fields at ISSP and in continuous fields at IMR-Tohoku and LNCMI Grenoble. This collaboration has already yielded significant scientific results on semi-metals such as graphite, Kondo insulators, and certain magnetic materials. This stay follows a project funded by JSPS in 2023 to study the exotic superconductor  $UTe_2$ , which exhibits unique and remarkable properties in intense magnetic fields.

During this period, I had the opportunity to collaborate with Prof. D. Aoki from Tohoku University and to visit his laboratory in Oarai at the beginning of my stay to characterize and pre-select several high-quality and very homogeneous crystals. Subsequently, with the help of Y. Kohama and his student N. Matsuyama, we improved the technique and measurement program of specific heat developed in Grenoble. Finally, we conducted a measurement campaign at IMR-Tohoku with the assistance of M. Kimata, where we obtained original

and crucial data for understanding the re-entrant superconductivity in  $UTe_2$ .



This stay was therefore very enriching, rich in scientific collaborations and interactions, rich in experimental learning thanks to the excellence of my collaborators and Japanese facilities. But also on a personal level, I experienced memorable adventures such as fishing for catfish, visiting the gates of hell at Osore-zan, playing the koto and drums, and more. Understanding and building bridges across different cultures is also a key factor in developing and encouraging fruitful scientific collaborations. And for this, I am very grateful to all the people who helped me and made my stay unforgettable. Domo arigato gozaimashita!



# 客員所員を経験して

群馬大学環境創生部門 環境エネルギーコース 樋山 みやび

私は 2023 年 4 月から 1 年間、東京大学物性研究所で客員所員として受け入れていただきました。ホストの秋山英文教授ならびに秋山研究室のみなさん、共同利用係の方々には大変お世話になりました。

私は、2013 年から 2017 年まで、4 年ほど特任研究員として秋山研究室で過ごさせていただきました。秋山研では、ホタル生物発光の基質であるルシフェリンと、発光体であるオキシルシフェリンの電子励起状態を解明するため、量子化学計算により吸収・蛍光スペクトルの解析を行ってきました。群馬大へ移ってからは物性研共同利用に申請することで、理論計算だけでなく、生物発光の定量計測もできるようになりました。その後、2020 年度に 1 年間客員所員として受け入れていただきました。2020 年度はコロナ禍で県外への移動が規制されていたため、群馬大で合成したケージド化合物の光解離実験や、ホタル生物発光の基質類似体を使った生物発光実験は後期からやっと行うことができました。

2023 年度は 4 月から出張が可能でしたが、学生たちがコロナウイルスやインフルエンザに感染して、直前で出張をキャンセルすることが度々あり、来所手続きでは物性研スタッフの方々に助けていただきました。ホタル生物発光基質類似体の共同研究が進み、新しい類似体の発光測定、発光体の観測を目指した発光反応途中の化合物の吸収・蛍光計測、レーザー光をつかった光褪色測定へ展開することができました。また、物性研スパコンを利用して、量子化学計算により類似体の吸収・蛍光スペクトルの解析が進みました。この期間に、タンパク質の専門家である井上先生と生物発光酵素であるルシフェラーゼに関する共同研究について打ち合わせする機会を得ました。

発光生物における発光反応は「ルシフェリン-ルシフェラーゼ反応」と呼ばれ、ホタル生物発光はその発光効率の高さ、反応物質の毒性の低さから、遺伝子発現や癌細胞の可視化に利用され、海洋生物の発光反応は免疫測定に用いられています。ルシフェリン-ルシフェラーゼ反応は、そ

の有用性から基礎研究だけでなく応用研究も進んでいます。そこで、この反応をトピックスとして、より広い視点で発光生物研究を捉えるための短期研究会「理論・実験の融合研究：ルシフェリン-ルシフェラーゼ反応」を 3 月に開催させていただきました。研究会や学会が重なる忙しい時期であったにもかかわらず、有機合成分野・大規模計算機科学分野・生物学分野・精密定量分光計測分野・生体化学分野等を専門とする先生方が参加してくださり、意見交換をする機会を得ることができました。

客員所員の研究期間はあっという間に終わってしまいましたが、今後、物性研共同利用を申請して、新しい共同研究を発展させていきたいと考えています。最後になりますが、秋山教授、小林助教、秋山研のみなさんに改めて感謝したいと思います。





# 客員所員を経験して

自然科学研究機構 核融合科学研究所 プラズマ量子プロセスユニット 星 健夫

2023 年度に客員所員を務め、その報告を依頼されましたが、馴染みのない方が多いと思いますので、自己紹介から始めたいと思います。私の出身は東京大学工学部物理工学科でして、バックグラウンドは計算物質科学、特に電子状態計算です。2023 年 8 月から、核融合科学研究所 (NIFS)(<https://www.nifs.ac.jp/>)に赴任しました。NIFS の最寄り駅は JR 多治見駅です。多治見駅は、名古屋駅から快速で 40 分、特急で 20 分の距離にあり、名古屋大からは近いです。NIFS の主な設備としては大型ヘリカル装置 (LHD, <https://www.lhd.nifs.ac.jp/>)、および、スーパーコンピュータ「雷神」(<https://nsrp.nifs.ac.jp/>)です。核融合科学の主体はプラズマで、物理学会ですと領域 2 に相当します。私はこれまで核融合(プラズマ)科学には縁がなかったのですが、データ駆動科学の立場からはアルゴリズムが共有でき、プラズマ実験のデータ解析も始めております。物理的にみても、計測手法は物性科学と核融合科学で共通性が高く、シナジーがあるように思っています。

私は ISSP には、スパコン利用や研究会参加などで、長年にわたってお世話になっています。特に、吉見一慶氏

を PI とする「ソフトウェア開発・高度化プロジェクト (<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/>)には、2016 年度課題「シフト型クリロフ理論を中核とした物性計算むけ大行列数値ソルバー」、2020 年度課題「二次元物質構造解析むけ実験データ解析の高度化」、2021 年度課題「二次元物質構造解析むけ実験データ解析の統合プラットフォーム」で提案者を務めさせていただきました。2020-2021 年度課題の成果物プログラム「2DMAT」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>, 図 1)は、逆問題型データ解析フレームワークであり、物性物理・プラズマ物理の両分野において、計測データ解析に有用です。

2023 年度は、川島直輝先生を主なホストとして客員所員を務めました。主な内容は、2DMAT の利活用を目的とした吉見氏との共同研究でした。私自身が年度の途中で異動になったこともあり、バタバタした 1 年になってしまいましたが、ISSP に滞在させていただき、研究がおおいに発展しました。



図 1 データ解析フレームワーク 2DMAT の Web ページ

外部に見える主な活動は、2件があります。1件目はISSP 短期研究会「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」開催[1]ですが、これについては別記事での報告を依頼されているので、ここでは触れません。2件目は、講習会「CCMS ハンズオン: 2DMAT 講習会」[2]です。実習を含む講習会で、講師・運営をお引き受けくださった、吉見一慶氏・本山裕一氏・井戸康太氏 (ISSP) には大変感謝申し上げます。実は、2021年4月と2022年4月にも同様の講習会を開きましたが、そのときはコロナのためオンラインのみの開催となりました。今回もオンラインのみの開催でも良いのでは、という声がありましたが、せっかくの機会なので、ハイブリッド開催にさせていただきました。結果として、参加者15名程度のうち、対面参加は3名のみでした。しかし、実習におけるフォローなどは対面の方が効率がよく、これからも同様の講習会をやるときは、ハイブリッド開催をしたいと思いました。運営者と対面参加者の方とは、講習会終了後、物性研内のお寿司屋さんで夕食を食べました。オンライン会議が当たり前の時代にはなりましたが、対面で話す楽しさを、改めて知りました。

このような貴重な経験をさせていただき、ISSP 客員所員制度には感謝いたします。また、事務手続きを担当してくださった川島研秘書の方々にも御礼もうしあげます。

ところで、客員研究員の期間内に、物性研と核融合研の橋渡しの活動も行なっておりました。研究会[1]・講習会[2]は、核融合研との共催といたしました。また、オープンサイエンスの重要性について、吉見氏に核融合研での講演をお願いしました[3]。ソフトウェアポータルサイト「MateriApps」(<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>)など、核融合研メンバーにとって、大変良い刺激になったように思います。また、2024年5月20-21日には核融合研で分野横断型研究会が開かれます[4]。

客員研究員は終了しましたが、2DMAT 機能拡張プロジェクトがISSP ソフトウェア開発・高度化プロジェクトの2024年度課題「先端計測むけデータ解析フレームワークの汎用化」に採択されたこともあり、引き続き、ISSP にはお世話になると思います。よろしくお願いいたします。

[1] ISSP 短期研究会「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」、東京大学物性研究所/ハイブリッド開催、2024年2月19-20日、主催：東京大学物性研究所、共催：核融合科学研究所、DxMT データ連携部会；<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/6295>

[2] 講習会「CCMS ハンズオン: 2DMAT 講習会」、東京大学物性研究所/ハイブリッド開催、2024年3月28日；<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/6432/>.

[3] 核融合研談話会、「オープンサイエンスに向けたデータ創出・活用」、吉見一慶(東京大学)、2024年3月15日、核融合研/ハイブリッド開催；  
<https://www.nifs.ac.jp/about/reio/colloquium/240315.html>

[4] 研究会「数理学・プラズマ科学・物質科学の共通研究拠点形成」、2024年5月20-21日、核融合研/ハイブリッド開催；<https://sites.google.com/view/nifs-workshop-20240520/>

# 客員所員を経験して

東京理科大学 貞清 正彰

2023 年度に客員所員として一年間お世話になりました、東京理科大学の貞清正彰です。まず、ホストとして受け入れていただきました附属中性子科学研究施設長の山室修教授をはじめ、山室研究室の方々に大変お世話になりましたこと、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

私は多孔性固体、特に配位高分子(PCP)や金属有機構造体(MOF)と呼ばれる物質群におけるイオン伝導性の研究を行ってきました。固体中のイオン伝導は電子伝導とは異なり、構成要素が密に詰まった構造は理想的ではなく、イオンが伝播するための何らかの空隙が必要です。そのため、小分子が1~数分子程度入ることができる微細な規則性細孔を持つ配位高分子は、イオンの伝播に適している物質群と言え、現在では1つの大きな研究領域となっています。

イオン伝導度は、 $\sigma = zen\mu$  ( $z$ : キャリア価数,  $e$ : 電気素量,  $n$ : キャリア濃度,  $\mu$ : キャリア移動度)で表されるため、高いイオン伝導度の実現には高いキャリア濃度と移動度が必要です。配位高分子の場合、外部から細孔内に吸着されたゲスト分子が、キャリアとなるイオンの伝播を媒介してその移動度を高めることができるのが大きな特徴です。2009 年以降、筆者らを含め、キャリアとしてプロトン( $H^+$ )を用いたプロトン伝導性配位高分子の研究が盛んに行われるようになりました。これは、配位高分子の余剰な細孔空間に水分子やイミダゾール分子など、 $H^+$ の伝播を媒介することができるゲスト分子を導入することで  $H^+$ の移動度を高めることができる性質を利用したものでした。筆者らは 2012 年以降に、この考え方を別のイオン種にも拡張し、水分子により伝播が著しく促進されることが知られている水酸化物イオン( $OH^-$ )をキャリアとする、水酸化物イオン伝導性配位高分子の創出にも成功しました。

2019 年に現所属の東京理科大学に異動した後は、現在注目しているトピックの1つであるマグネシウムイオン( $Mg^{2+}$ )伝導の研究を始めました。 $Mg$  は資源豊富であり、 $Mg^{2+}$ 伝導体は次世代二次電池の電解質としても開発が期待されています。一方で、二価イオンである  $Mg^{2+}$ の固体中での伝播は、その強い静電相互作用により極めて困難であるため、室温付近で高イオン伝導性を示す新たな材料の開発が求められていました。筆者らは  $Mg^{2+}$ をキャリアと

して細孔内に包接した配位高分子が、特定の有機ゲスト分子の蒸気存在下で高イオン伝導性を示す、ゲスト誘起イオン伝導現象を見出しました。これにより、最適な条件では室温で  $10^{-3} S cm^{-1}$  を超える世界最高値の超イオン伝導性を示す化合物の創出に成功しました。これは、吸着された有機ゲスト分子が  $Mg^{2+}$ に配位した配位性イオンキャリアを形成することで、静電相互作用を緩和し、移動度を向上させることができたためだと考えられました。一方で、伝播していると予想されているゲスト分子と  $Mg^{2+}$ からなる配位性イオンキャリアのダイナミクスに関する情報はありませんでした。

そんな折、プロトン伝導性配位高分子の中性子準弾性散乱に関する共同研究に関連して以前からお世話になっていた山室先生と、研究について議論させていただく機会があり、今回、客員所員として一年間過ごす機会をいただきました。山室先生との共同研究を進める中で、JRR3 を使った中性子準弾性散乱実験により、超  $Mg^{2+}$ 伝導性配位高分子中において、ゲスト分子の運動に由来する準弾性散乱を観測し、その運動性を直接観測することができました。これについては、様々なタイムスケールでの追加実験を含めて、現在も継続的に研究が進行中です。また一方で、共同研究に関連して多くの議論をさせていただく中で、ゲスト分子の運動性に関連する新たな研究の種も見つけることもでき、その点についても大変嬉しく思っております。

最後になりましたが、このような重要な機会を与えていただきました物性研関係者の皆様に、この場を借りて深く感謝申し上げます。

# 物性研究所短期研究会

## 「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」 報告

自然科学研究機構 核融合科学研究所 プラズマ量子プロセスユニット 星健夫

2024年2月19-20日

物性研大講義室(6階)/ハイブリッド開催

<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/6295>

主催：東京大学物性研究所

共催：核融合科学研究所、DxMT データ連携部会

今日、シミュレーションと先端実験のデータ連携が世界の潮流となっている。本研究会では、物性物理学分野でのデータ連携を俯瞰し、プラットフォーム構築などの未来を見通すことを目的とした。世話人は、筆者(星)の他、松田巖、三澤貴宏、吉見一慶、尾崎泰助、川島直輝(ISSP)である。研究会では、招待講演11件、一般講演2件、ポスター講演18件が発表された。このうち一般講演2件(榊原、吉澤)は、当初ポスター講演として申し込まれた講演のうち、世話人内の投票により、口頭発表に昇格されたものである。参加申込者は78名であり、対面参加者は28名であった。懇親会参加者は20名であった。アブストラクト集の表紙(図1)、および、集合写真(図2)、ポスターセッションの様子(図3)を掲載した。また、スーパーコンピュータ(ohtaka)の見学会も開かれた(図4)。

本研究会は基調講演である、出村雅彦(NIM)「マテリアルDXプラットフォーム構想の実現に向けて」からスタートした。文部科学省マテリアルDXプラットフォーム構想

が、データをつくる「マテリアル先端リサーチインフラ事業(ARIM)」、データをためる「データ中核拠点事業(DICE)」、データをつかう「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)」の3事業からなることが説明され、全体を俯瞰したうえで、いくつかの事例が紹介された。関連したポスター講演(P07)もあった。他の招待講演は、シミュレーションを用いた系統的データ収集・応用に関する講演が4件(熊谷、福島、是常、福田)、および、2次元物質に関する講演が6件(虻川、深谷、Shu-Jung Tang、柚原、中川、土師、星)であった。実験・計算の両面から発表があったが、活発な議論がおこなわれた。総論としては、物性物理学にインフォマティクスが導入されたかなりの年月が経つが、シミュレーションにせよ実験にせよ、「質」が高いデータを収集することが有益な研究につながると個人的に感じた。文末になってしまったが、事務作業を行なってくださった、川島研秘書のみなさまに、御礼を申し上げる。

### 口頭発表プログラム：

2月19日(月)

- |             |   |
|-------------|---|
| 9:30-9:40   | はじめに  |
| 9:40-10:40  | 出村雅彦(物質・材料研究機構)<br>マテリアルDXプラットフォーム構想の実現に向けて |
| 10:40-11:00 | coffee break                                |
| 11:00-11:30 | 熊谷悠(東北大学)<br>非金属物質中の点欠陥に関する第一原理計算           |
| 11:30-12:00 | 福島鉄也(産業技術総合研究所)<br>磁性材料における物性データ創出とその活用     |
| 12:00-12:10 | 集合写真撮影                                      |
| 12:10-13:30 | lunch                                       |



- 13:30-14:00 是常隆 (東北大学)  
ワニエ有効模型のデータベースと物質設計
- 14:00-14:30 星健夫 (核融合科学研究所/高エネ研/東京大学)  
計測データ解析フレームワーク 2DMAT : 富岳を用いた 2 次元物質構造解析
- 14:30-15:00 深谷有喜 (原子力研究開発機構)  
陽電子回折・光電子分光・データ科学によるシリセンの構造探査
- 15:30-16:00 虻川匡司 (東北大学)  
RHEED 測定における高精度データピックアップとフーリエ変換による解析
- 16:00-18:00 ポスター講演 (対面のみ)
- 19:00-21:00 懇親会

2月20日(火)

- 9:50-10:20 榊原寛史 (鳥取大)  
多層系ニッケル酸化物超伝導体の理論計算に基づく物性予測
- 10:20-10:50 福田将大 (東京大学)  
AB2 型 2 次元材料の構造探索およびデータベース化とその応用
- 10:50-11:00 coffee break
- 11:00-11:30 柚原淳司 (名古屋大学)  
14 族元素からなるポストグラフェン物質の創出に向けて
- 11:30-12:00 中川剛志 (九州大学)  
二次元ホウ素薄膜の作製と構造解析 : ホウ化物との共存、分離
- 12:00-13:30 lunch
- 13:30-14:00 Shu-Jung Tang (National Tsinghua University)  
Enhanced Superconductivity and Rashba Effect in a Buckled Plumbene-Au Kagome Superstructure
- 14:00-14:30 吉澤俊介(NIMS)シリコン表面インジウム原子層における準粒子干渉の観測とシミュレーション
- 14:30-14:40 おわりに

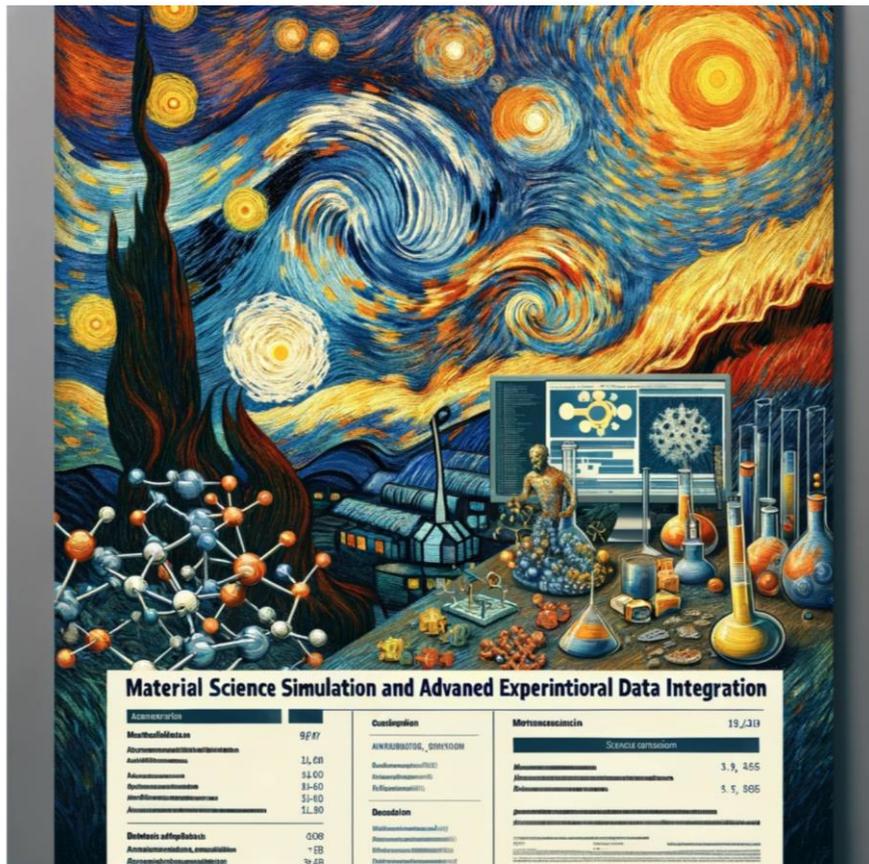
**ポスター発表プログラム :**

- P01 物性研究所ソフトウェア開発・高度化プロジェクト:大型計算機を活用した物質設計と評価  
東大物性研 青山龍美、本山裕一、吉見一慶、川島直輝
- P02 大規模電子状態計算と波束ダイナミクス法による有機薄膜太陽電池の電荷分離シミュレーション  
量研機構 藤田貴敏
- P03 計測データ解析フレームワーク 2DMAT による PTRF-XAFS 解析  
核融合研<sup>1</sup>、東大物性研<sup>2</sup>、鳥取大<sup>3</sup>、北大触媒研<sup>4</sup>  
星健夫<sup>1,2</sup>、沢頭孟<sup>3</sup>、高草木達<sup>4</sup>
- P04 物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps の紹介  
東大物性研<sup>1</sup>、山形大<sup>2</sup>、東大理<sup>3</sup>、RIST<sup>4</sup>  
井戸康太<sup>1</sup>、笠松秀輔<sup>2</sup>、加藤岳生<sup>1</sup>、川島直輝<sup>1</sup>、藤堂眞治<sup>3</sup>、福田将大<sup>1</sup>、吉澤香奈<sup>4</sup>
- P05 非平衡分子動力学法による欠陥が導入されたタングステンの格子熱伝導率の温度依存性への影響のシミュレーション  
総研大<sup>1</sup>、核融合研<sup>2</sup>、東大物性研<sup>3</sup>  
金森大悟<sup>1</sup>、向井啓祐<sup>1,2</sup>、星健夫<sup>1,2,3</sup>、長坂琢也<sup>1,2</sup>





ISSP短期研究会  
 「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」  
 アブストラクト集



generated by chatGPT

物性研大講義室 (6 階 )/Zoom  
 2024.Feb.19-20

図 1 アブストラクト集の表紙





図4 スパコン見学会に集う参加者





--- 集合写真 ---



--- 個別写真 ---





■■■■ プログラム ■■■■

■ 2024年3月8日(金)

10:00-10:10 廣井所長のご挨拶

◆ 座長 小林 真隆・東京大学

10:10-10:40 牧 昌次郎(電気通信大学)

「生体内深部可視化を刷新する発光イメージング材料」

10:40-11:10 口丸 高弘(自治医科大学)

「生物医学研究を展開する合成的発光反応」

11:10-11:20 休憩

11:20-11:50 嶋田 淳子(群馬大学)

「シャーガス病マウスモデルを用いたトリパノソーマ原虫の時空間的ダイナミクス」

11:50-13:40 昼食

◆ 座長 山本 典史・千葉工業大学

13:40-14:40 ポスタープレゼン

14:40-14:50 休憩

◆ 座長 野口 良史・静岡大学

14:50-15:20 中津 亨(和歌山県立医科大学)

「ホタル・ルシフェラーゼの立体構造をどのように使えば良いのか?」

15:20-15:50 小野 稜平(群馬大学)

「近赤外ホタル生物発光基質類似体 AkaLumine の発光量子収率」

15:50-16:00 休憩

16:00-16:30 樋山 みやび(群馬大学)

「ホタル生物発光基質およびその類似体の吸収・蛍光特性」

16:30-17:00 休憩

17:00-19:00 ポスター発表

■ 2024年3月9日(土)

◆ 座長 樋山 みやび・群馬大学

9:30-10:00 大場 裕一(中部大学)

「ルシフェラーゼの祖先配列復元」

10:00-10:30 山本 典史(千葉工業大学)

「コンピュータ化学で解き明かす原始ホタルの発光色」

10:30-10:40 休憩

10:40-11:10 ○北田 昇雄1、神谷 弦汰1、畠山 純平1、森屋 亮平1、2、木山 正啓3、岩野 智3、金 誠培4、平野 誉1、  
牧 昌次郎1

(1 電気通信大学、2 日本女子大学、3 宮崎大学、4 産業総合研究所)

「生物発光システムの応用を目指して」

11:10-11:40 野口 良史(静岡大学)

「機械学習と第一原理を用いたルシフェリン類似体の機能予測」

11:40-13:00 昼食

◆ 座長 秋山 英文・東京大学

13:00-13:30 招 11 林 久美子(東京大学)

「in vivo(個体内)観察に基づく神経細胞軸索輸送の物理」





## 物性研究所短期研究会

# 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の現在と未来」報告

物質設計評価施設 尾崎 泰助

日時：2024年4月3日(水)–4日(木)

場所：東京大学物性研究所6階大講義室

<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/news/5770>

所外組織委員：南谷英美（大阪大学）、坂井徹（兵庫県立大学）、篠田渉（岡山大学）、渡辺宙志（慶応義塾大学）

所内組織委員：尾崎泰助、川島直輝、杉野修、野口博司、三澤貴宏、吉見一慶、井戸康太、中野裕義、春山潤、福田将大

本短期研究会は、物性研スパコン共同利用と CCMS の成果報告会も兼ねて、毎年計算機関連の所員が輪番で代表世話人を努めている研究会である。

「富岳」に代表されるスーパーコンピュータと計算手法の両者の絶え間ない進展により、近年のシミュレーションは精緻、大規模かつ網羅的なものとなり、物理現象の本質的な理解に大いに貢献しているだけでなく、実験との協奏的研究においても多くの成果が生み出されている。さらに最近では機械学習手法の台頭により、驚くべき速さで人工知能技術が進展しており、物性・物質科学の研究においてもその活用が進んでいる。一方、物性研究所は 2022 年度に enaga から kugui へとシステム C の更新を行い、総理論演算性能として約 8PF の共同利用スパコンを有しており、全国中の研究者の物性・物質科学シミュレーションのプラットフォームを提供している。この様な国内外の計算物質科学の現状を踏まえ、本研究会は、物性研スパコンユーザ及び CCMS 関係者が集い、最近の計算事例に基づく情報交換の場を持つことによって、研究成果を共有し、さらに我々のコミュニティをどのように発展させていくべきかについて考察を深める機会となるべく企画・開催された。

昨年度に引き続き、完全オンサイトによる開催とし、参加登録数 66、実際の参加者は 4 月 3 日が 54 名、4 月 4 日が 52 名となった。口頭招待講演は初貝安弘氏(筑波大学)と近藤正章氏(慶應義塾大学)による特別講演を含めて 16 件、ポスター講演は 31 件であった。特に東西交流を促進するため、下川統久朗氏(OIST)、樋口克彦氏(広島大学)、土屋旬氏(愛媛大学)、藤井幹也氏(NAIST)に講演を依頼した。強相関係、第一原理計算、機械学習、ソフトマターの分子動力学計算など、幅広い話題の講演が行われ、活発な質疑応答がなされた(図 1)。強相関係や第一原理計算など従来からの研究分野における最近の進展が議論されるとと

もに、機械学習やデータ駆動科学に基づく手法が随所に活用された研究の紹介があった。これらの融合研究により、本質的に新しい視点が生み出されていることが分かり、「計算物質科学の現在と未来」を知る良い機会となった。また近藤正章氏による特別講演「次世代計算基盤に向けて：フィジビリティスタディの検討状況」では 5 年程度の近未来で実現されるスーパーコンピュータ開発への展望が紹介され、計算物質科学コミュニティにおけるソフトウェア開発への指針が得られた。ポスターセッション(図 2)については、ポスター賞にエントリーしたポスターの中から、参加者全員による投票によって、荒川泰政氏(山形大学)、山本哲也氏(慶應義塾大学)の 2 件を優秀ポスター賞の受賞者として選定し、研究会の最後に表彰式を行った(図 3)。講演やポスターセッションにおける質疑応答では学生を含めた若手研究者が活発に議論する様子が見られ、コミュニティメンバー間の相互交流を促進する良い機会となったと考えている。

4月3日(水)

- 12:55~13:00 Opening (物性研所長 廣井 善二)
- 13:00~13:50 初貝 安弘 (筑波大学) 【特別講演】 座長 川島直輝  
「強相関トポロジカル相の数値的研究」
- 13:50~14:20 大門 俊介 (量子科学技術研究開発機構)  
「深層学習 AI による量子伝導現象の解説」
- 14:20~14:50 下川 統久朗 (OIST)  
「実験的に測定可能な量子もつれ測度を用いた量子スピン液体の数値的研究」
- 14:50~15:05 Break
- 15:05~15:35 今田 正俊 (早稲田大学) 【巻頭論文】 座長 三澤貴宏  
「スーパーコンピュータを用いた高温超伝導と量子スピン液体の解明」
- 15:35~16:05 大久保 毅 (東京大学) 【高度化】  
「テンソルネットワーク法による二次元量子格子モデルの解析」
- 16:05~16:35 樋口 克彦 (広島大学)  
「非摂動 MFRTB 法による磁場下固体の磁気現象の解析」
- 16:40~18:00 ポスターセッション [6階ラウンジ]
- 18:15~ 懇談会「カフェテリア(物性研所前)」

4月4日(火)

- 09:30~10:20 近藤 正章 (慶應義塾大学) 【特別講演】 座長 尾崎泰助  
「次世代計算基盤に向けて：フィジビリティスタディの検討状況」
- 10:20~10:50 藤井 幹也 (NAIST)  
「デジタル技術によるクロズドループを用いた材料設計とプロセス開発」
- 10:50~11:05 Break
- 11:05~11:35 土屋 旬 (愛媛大学) 座長 吉見一慶  
「第一原理計算による地球惑星内部における含水物質の研究」
- 11:35~12:05 永井 佑紀 (東京大学)  
「機械学習によるシミュレーションの高速化：自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」
- 12:05~13:10 Lunch
- 13:10~13:40 是常 隆 (東北大学) 座長 杉野修  
「第一原理ワニエ有効モデルに関する最近の発展」
- 13:40~14:10 尾崎 泰助 (東京大学)  
「基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の開発」
- 14:10~14:40 佐藤 駿丞 (筑波大学)  
「時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理アト秒電子ダイナミクス計算」
- 14:40~15:00 Break
- 15:00~15:30 川口 一朋 (金沢大学) 【巻頭論文】 座長 野口博司  
「分子動力学計算による脂質二重膜中の超長鎖脂肪酸の構造の解明」
- 15:30~16:00 岡崎 圭一 (分子研)  
「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるタンパク質構造変化ダイナミクスの解明」
- 16:00~16:30 山本詠士 (慶應義塾大学)  
「生体分子動的構造体における分子挙動解明に向けた分子動力学シミュレーションによる取り組み」
- 16:30~16:35 Closing (+ポスター賞表彰式)







図 2: ポスターセッションの様子



図 3: 優秀ポスター賞の授与式





# ISSP ワークショップ

## デバイス活用で臨む有機伝導体の未来

【日時】 2024年3月26日(火) 9:30-17:40

2024年3月27日(水) 9:30-17:00

【会場】 東京大学 柏キャンパス 物性研究所 A棟 6階 A632 大講義室および Zoom

【世話人】 井手上敏也 (物性研・凝縮系物性研究部門)、大池広志 (JST さきがけ、工学系研究科)、岡本佳比古 (物性研・物質設計評価施設)、高木里奈 (物性研・凝縮系物性研究部門)、藤野智子 (物性研・凝縮系物性研究部門)、三輪真嗣 (物性研・量子物質研究グループ)、渡邊峻一郎 (新領域創成科学研究科)

【URL】 <https://rtakagi.issp.u-tokyo.ac.jp/workshop240326/>

これまで有機伝導体の研究は、低次元・強相関に由来する物性発現の舞台として分子性導体を中心に発展してきた。一方、有機半導体やポリマーにおいては有機エレクトロニクスへの活用に向けたデバイス化が進められている。最近ではこうしたデバイス化を分子性導体にも適用し、キャリアドープや応力印加など新たな外場制御による物性探索が行われてきている。しかしながら、分子性導体は合成・測定・微細加工が難しいことが多く、更なる研究の発展には物理・化学・工学の各分野の交流が不可欠である。

こうした背景のもと、本ワークショップでは、分子性導体、有機エレクトロニクス・スピントロニクス、無機ファ

ンデルワールス結晶、グラファイトなど、「分子」をキーワードとする幅広い研究分野から若手研究者を中心に、29名の講演者を招待した。各講演では、物理学会、応用物理学会、化学会等の各専門領域における最先端の話題が取り上げられ、発表では前提知識から最新の研究結果までをわかりやすく説明するよう工夫されていた。

ワークショップでは、物理・化学・工学、実験・理論の多様なバックグラウンドを持つ研究者が密に議論し、交流を深めることを目的とした。特に異なる研究分野の参加者との議論を活性化したいと考え、世話人から事前に講演者に対して、自身の研究内容と物性、物質、機能、デバイス

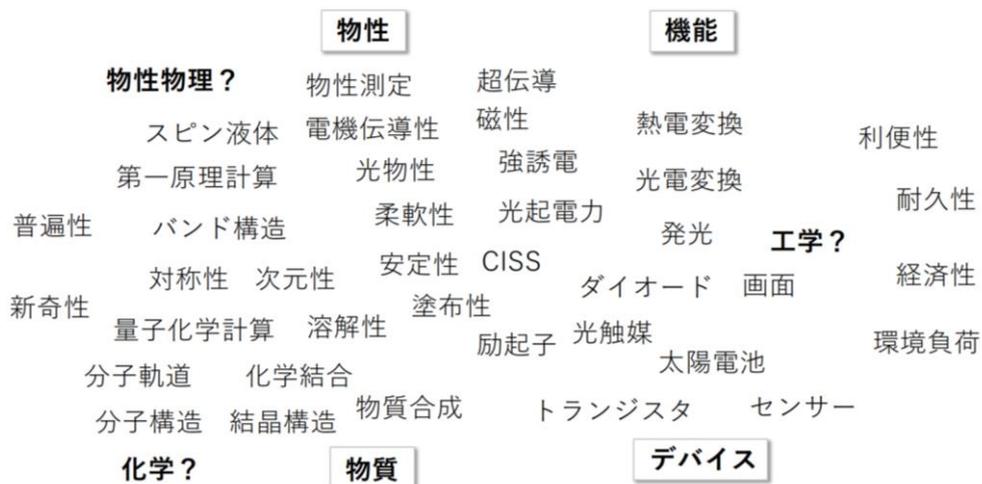


図1: 本ワークショップの講演で出てきたキーワード



- 13:15-13:40 横田 知之 (東京大学), 有機半導体を用いたフレキシブルセンサ応用  
 13:40-14:05 玉井 康成 (東大新領域), 有機光電変換デバイスの開発と分光学的研究  
 14:05-14:30 須田 理行 (京都大学), キラルファンデルワールス超格子によるキラル物性の開拓
- 14:50-15:15 坪 広樹 (大阪大学), 分極有機導体  
 15:15-15:40 須波 圭史 (産総研), 光電融合技術の基盤となる高性能電気光学材料としての有機強誘電体  
 15:40-16:05 小林 拓矢 (埼玉大学), 部分的にセレン置換した BEDT-TTF 系有機導体の開発
- 16:25-16:50 圓谷 貴夫 (熊本大学), 第一原理計算でひも解くトポロジカル物質のバルク・表面電子状態と熱電特性  
 16:50-17:15 岡本 佳比古 (東大物性研), 一次元ファンデルワールス結晶の物質開拓と熱電特性  
 17:15-17:40 井手上 敏也 (東大物性研), ファンデルワールスヘテロ界面のデバイス物性

3月27日(水)

- 9:30-9:55 井上 悟 (東京大学), 層状有機半導体の長鎖アルキル置換効果  
 9:55-10:20 荒井 俊人 (物質・材料研究機構), 有機トランジスタの高効率キャリア輸送に向けた分子配列制御  
 10:20-10:45 渡邊 峻一郎 (東大新領域), 有機二次元正孔ガスの物性とデバイス応用
- 11:05-11:30 井口 弘章 (名古屋大学), ナノ細孔を有する分子性導体の開発  
 11:30-11:55 浦谷 浩輝 (京都大学), 有機薄膜太陽電池におけるエキシトン解離過程の実時間シミュレーションと可視化  
 11:55-12:20 筒井 祐介 (京都大学), 新規ヘテロヘリセンの光物理過程
- 13:20-13:45 田縁 俊光 (東大物性研), グラファイトにおいて薄膜デバイス化がもたらす強磁場誘起電子物性  
 13:45-14:10 田中 未羽子 (東大物性研), Magic-angle twisted 2層グラフェンの慣性インダクタンス測定とギャップ異方性  
 14:10-14:35 古川 哲也 (東北大学), 有機磁性体・有機ディラック電子系における熱伝導・熱電物性  
 14:35-15:00 橋本 顕一郎 (東大新領域), (EDO-TTF-I)2ClO4 におけるアニオン自由度による逐次相転移: スピン分裂を伴う補償フェリ磁性の可能性
- 15:20-15:45 浦井 瑞紀 (東大物性研), 三角格子を有する分子性物質の核磁気共鳴を用いた磁性研究  
 15:45-16:10 杉浦 栞理 (東北大学), 量子デバイス応用の可能性を持つ超伝導渦糸状態の伝導ノイズ測定による観測  
 16:10-16:35 今城 周作 (東大物性研), 量子有機エレクトロニクスに向けた強相関電子物性とその計測技術  
 16:35-17:00 大池 広志 (東京大学), 強相関電子系が内包する分野横断的概念









**標題** : Probability control nonreversible Markov chain Monte Carlo

**日時** : 2024 年 4 月 11 日(木) 午後 1 時~午後 3 時

**場所** : 物性研究所本館 6 階 第 4 セミナー室 (A614)

**講師** : Hidemaro Suwa

**所属** : Department of Physics, The University of Tokyo

**要旨** :

In recent developments, Monte Carlo methods that strategically break detailed balance to manipulate the flow of probabilities have emerged [1]. These methods include optimizing the transition probabilities during state updates. We developed an optimization algorithm designed to minimize the rejection probability and successfully applied it to various statistical mechanical models, such as the Potts model and quantum spin systems [2]. Further, we introduced an algorithm capable of controlling the rejection rate through a single parameter, revealing that reducing the rejection rate leads to an exponential increase in computational efficiency [3]. Another intriguing strategy for breaking detailed balance is the concept of lifting, which expands the state space to introduce probability flow in the enlarged state space. The lifting technique is particularly effective in particle systems, as demonstrated by the event chain Monte Carlo method [4]. In this talk, reviewing these approaches to constructing nonreversible Markov chains, we will present the lifted directed-worm algorithm [5,6] and the multi-replica swap optimization of the replica exchange method (namely, parallel tempering). These probability control nonreversible Markov chains significantly improve the computational efficiency of Monte Carlo sampling.

[1] H. Suwa and S. Todo, *Butsuri* 77(11) 731-739 (2022).

[2] H. Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.* 105, 120603 (2010).

[3] H. Suwa, *Physica A* 633, 129368 (2024).

[4] W. Krauth, *Front. Phys.* 9:663457 (2021).

[5] H. Suwa, *Phys. Rev. E* 103, 013308 (2021).

[6] H. Suwa, *Phys. Rev. E* 106, 055306 (2022).

**標題** : Nanoscale 3D imaging through raster scan X-ray microscopy

**日時** : 2024 年 4 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** : Zirui Gao

**所属** : Brookhaven National Laboratory, New York, USA

**要旨** :

We have recently developed a novel raster-scanning based X-ray microscopy method at the Hard X-ray Nanoprobe (HXN) beamline of National Synchrotron Light Source II [1]. Our new method can achieve sub-10 nm resolution with acquisition speed ~20 times faster than our previous approaches. The method utilizes ptychography in 2D fly-scan mode at an acquisition frame rate of 1250 diffraction patterns per second, currently limited by the fastest frame rate of the Eiger1 1M detector. By using ptychography, which is a coherent diffraction imaging method that reconstructs complex images of the sample through iterative phase retrieval algorithms [2], the sample image can be reconstructed at pixel size of 4.87 nm, providing imaging speed far beyond acquisition frame rate. As shown in Fig. 1(Left) is the reconstructed phase image of a Siemens star sample, our method can resolve the smallest features inside the pattern with 8 second of measurement time for a 2  $\mu\text{m}$  x 2  $\mu\text{m}$  field of view, effectively reaching an imaging speed of 23000 pixels per second.



Our new raster scan instrument also allows tomography measurement by acquiring 2D projections of the sample at different rotation angles. The sample stages and interferometry reference system are specially designed for precise rotation alignment with  $<0.5 \mu\text{m}$  drift to minimize tomography acquisition overhead and increase imaging speed. As shown in Fig. 1(Right) is the reconstructed phase tomogram of a cylindrical-shaped microelectronics sample extracted from an Intel® processor, the entire tomography acquisition took 53 minutes in real time for an imaged region of  $2 \mu\text{m}$  diameter and  $3 \mu\text{m}$  height. The zoom-in view in Fig. 1(Right) shows the smallest resolvable feature in the tomogram which appears to be metallic connectors in transistors. In this talk, I will cover the key concepts and technical implementations of our novel imaging method.

**標題** : Operator Growth in Open Quantum Systems : Perspectives from Lindbladian SYK via Krylov Complexity

**日時** : 2024 年 4 月 24 日(水) 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** : Budhaditya Bhattacharjee

**所属** : Center for Theoretical Physics of Complex Systems, Institute for Basic Science

**要旨** : Abstract:

In this talk, I will discuss some general features of operator growth in open quantum systems governed by Lindbladian evolution. I will introduce two orthonormalization techniques, namely Arnoldi and BiLanczos algorithms, using which I will capture the evolution of the operator in an appropriate basis. In these bases, many features of the evolution of operators (including relevant time scales) will emerge naturally. I will motivate these bases choices from results in closed quantum systems. I will utilize the paradigmatic setup of the Sachdev-Ye-Kitaev model to describe the system and environment, and closely related system-environment interaction. I will present numerical results in this setup and derive some analytical results. I will also discuss the nature of correlation function and spectral function in such open quantum systems. Then I will discuss features of a large class of probes (that do not rely on the same choice of basis) in such systems. I will end by mentioning implications of these results in other areas of research, and some open questions/future directions.

References:

[1] Operator dynamics in Lindbladian SYK: a Krylov complexity perspective, JHEP 01 (2024) 094

[2] Operator growth in open quantum systems: lessons from the dissipative SYK, JHEP 03 (2023) 054

**標題** : Higher symmetry and logical gates of (3+1)D  $Z_2$  toric code

**日時** : 2024 年 4 月 25 日(木) 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)および Online

**講師** : 小林 良平

**所属** : University of Maryland

**要旨** :

It has recently been understood that the complete global symmetry of topological gauge theories contains the structure of a higher-group. In this talk, we look at the algebraic structure of symmetry in (3+1)D  $Z_2$  gauge theory with an emergent fermion, and point out that pumping chiral  $p+i\pi$  topological states gives rise to a  $Z_8$  0-form symmetry with mixed gravitational anomaly. This ordinary symmetry mixes with the other higher symmetries to form a 3-group

structure, which we discuss in detail. We then see that in the context of stabilizer quantum codes, one can obtain various logical non-Clifford gates of (3+1)D Z<sub>2</sub> toric code (w/ emergent fermion) including the CCZ, CS and T gates, which are all implemented by pumping a p+ip topological state through a 3d space. The talk is mainly based on a recent work with Maissam Barkeshli and Po-Shen Hsin, which is found in <https://arxiv.org/abs/2311.05674>.

**標題** : Wafer-scale CVD graphene-based Josephson field-effect transistors: toward superconducting quantum integrated circuits

**日時** : 2024年4月25日(木) 午後1時30分~午後2時30分

**場所** : 物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**講師** : Heorhii Bohuslavskiy

**所属** : VTT Technical Research Centre of Finland

**要旨** :

Josephson field-effect transistors (JoFETs) are some of the most desired building blocks of superconducting electronics. Instead of electric current or magnetic flux control of superconductivity, the superconducting proximity coupling in JoFETs can be controlled with an electrostatic gate. Owing to its unique properties, graphene has been identified as a promising candidate for the JoFET channel (weak link). The all-electrical control of JoFETs is expected to enable a plethora of applications in graphene-based quantum coherent electronics, classical digital superconducting electronics, microwave bolometers, non-reciprocal components, and quantum-limited parametric amplifiers [1-3].

In my talk, I will present our recent results on the scalable chemical vapor deposition CVD graphene JoFET platform developed at VTT [4]. A cross-sectional schematic featuring our JoFET device structure is shown in Fig. 1(a). Using the top-down fabrication process on 6" (150 mm) wafers with optimized contact resistance and wafer-scale device yield reaching 90% (see Fig. 1(b)), we demonstrate the local top gate tunability of superconducting proximity coupling in aluminum-graphene-aluminum Josephson junctions (see Fig. 1(c)) and study the JoFET geometry and temperature dependences. Building upon our unique wafer-scale JoFET platform, I will discuss our next steps toward large-scale classical and quantum coherent superconducting electronics.

[1] Wang et al. Nat Nano. 14, 120–125 (2019).

[2] Kokkoniemi et al., Nature 586, 47–5 (2020).

[3] Butseraen et al., Nat. Nano. 17, 1153–1158 (2022).

[4] Generalov et al. arXiv:2401.05089 (2024).

**標題** : Anomaly, SPT, Generalized Symmetry

**日時** : 2024年4月26日(金) 午後4時~午後5時

**場所** : 物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**講師** : 大森 寛太郎

**所属** : 東京大学大学院 理学系研究科物理学専攻

**要旨** :

In 1969, Adler and Bell-Jackiw predicted the phenomenon now called quantum (ABJ) anomaly, which is the breaking or deformation of conservation law associated to a classical symmetry.

Fast forward to 2010s, it is understood that this phenomenon is closely related by the symmetry protected topological phase (SPT) proposed by X.G. Wen, promoting interactions between QFT theorists and condensed matter theorists.

In this talk I would like to review how those interdisciplinary interactions has been developed from modern viewpoint, and also show the trend continues in the recent research.

**標題：多量体を形成する遷移金属酸化物の X 線光電子分光・吸収分光/ナノ構造物質からの高次高調波発生：バンド内遷移とバンド間遷移**

**日時：2024年5月20日(月) 午後1時～午後3時**

**場所：物性研究所本館6階 第一会議室 (A636)&Online (ハイブリッド)**

**講師：大川 万里生 氏      中川 耕太郎 氏**

**所属：物性研究所 岡崎研究室      松永研究室**

**要旨：**

**(1) 講師：大川 万里生 氏**

題目：多量体を形成する遷移金属酸化物の X 線光電子分光・吸収分光

概要：

V 等の遷移金属酸化物では多量体形成により絶縁体相が安定化している例がしばしばみられる。光電子分光や X 線吸収分光は、物質の電子状態を直接反映したスペクトルが得られるため、遷移金属の多量体形成の検証に有用である。我々は、c 軸 Ti 二量体を形成するコランダム Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の Ti-Mg 置換効果を X 線吸収分光により、またパイロクロア格子中の W が三量体形成するとされる CsW<sub>2</sub>O<sub>6</sub> を X 線光電子分光により調べたので報告した。

[1] M. Okawa et al., PRB 108, 159108 (2023).

[2] R. Nakamura et al., PRB 106, 195104 (2022).

**(2) 講師：中川 耕太郎 氏**

題目：ナノ構造物質からの高次高調波発生：バンド内遷移とバンド間遷移

概要：

高次高調波発生 (HHG) はアト秒パルス発生や X 線光源などの応用に向けて注目され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[1]、特に電子のバンド内とバンド間での遷移によってその発生機構が理論的に議論されている。しかしながら、実験的にそれらの寄与を切り分ける研究は少ない。本講演では、ナノ物質であるナノ粒子とグラフエンに注目して、電子のバンド内遷移やバンド間遷移を制御し、HHG への寄与を解明した[2,3]。

[1] S. Ghimire et al., Nat. Phys. 7, 138 (2011).

[2] K. Nakagawa et al., Nat. Phys. 18, 874-878 (2022).

[3] K. Nakagawa et al., under review.

**標題：Stars in your eyes – monodisperse macromolecules for photonic and optoelectronic applications**

**日時：2024年5月27日(月) 午後3時～午後4時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：Prof. Peter J. Skabara**

**所属：School of Chemistry, University of Glasgow Glasgow, United Kingdom**

**要旨：**

We have developed a synthetic approach that allows us to synthesise monodisperse organic and semiconductor macromolecules on the gram scale. In contrast to conjugated polymers, batches are prepared with 100% reproducibility and the products can be isolated in high purity. These attributes are extremely well valued, because subsequent work





〈 客員:テーマ提案型 〉

R6.4.1	奥村 久士	附属物質設計評価施設	客員准教授	本務:自然科学研究機構生命創成探究センター 期間:令和6年4月1日～令和7年3月31日
--------	-------	------------	-------	--

〈 客員:テーマ限定型 〉

R6.4.1	岡田 佳憲	ナノスケール物性研究部門	客員准教授	本務:沖縄科学技術大学院大学量子物質科学ユニット 期間:令和6年4月1日～令和7年3月31日
R6.4.1	木村 健太	附属中性子科学研究施設	客員准教授	本務:大阪公立大学大学院工学研究科物質化学生命系専攻 期間:令和6年4月1日～令和7年3月31日

〈 定年退職 〉

R6.3.31	上床 美也	附属物質設計評価施設	教授	東京都市大学 客員教授へ
---------	-------	------------	----	--------------

〈 辞職 〉

R6.3.31	春山 潤	機能物性研究グループ	助教	理化学研究所開拓研究本部 研究員へ
R6.3.31	澁谷 孝	附属極限コヒーレント光科学研究センター	一般技術職員	物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター 学術専門職員へ



【事務部門等】

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

〈早期退職〉

R6.3.31	青木 敦弘	物性研究所	事務長	
---------	-------	-------	-----	--

〈転出〉

R6.3.31	大木 幹夫	物性研究所	副事務長	情報システム部情報支援課 副課長へ
R6.3.31	大平 理美	物性研究所総務係	係長	大気海洋研究所総務チーム 係長へ
R6.3.31	三浦 幸栄	物性研究所附属研究施設事務室	係長	大学院理学系研究科等経理課 上席係長へ
R6.3.31	守屋 文葉	附属図書館柏地区図書課資料管理チーム	主査 (物性研図書室担当)	情報システム部情報基盤課学術情報チーム主査へ

〈転入〉

R6.4.1	福岡 高明	物性研究所	事務長	社会連携部社会連携推進課 課長から
R6.4.1	菅原 啓一	物性研究所	副事務長	情報システム部情報支援課 副課長から
R6.4.1	川辺 幸一	物性研究所	副事務長 (兼:附属研究施設事務室長)	教養学部等経理課 副課長(経理・数理科学研究科担当)から
R6.4.1	和田 洋平	物性研究所総務係	係長	情報システム部情報戦略課総務チーム 係長から
R6.4.1	宮井 杏佳	附属図書館柏地区図書課資料管理チーム	一般職員 (物性研図書室担当)	文学部・人文社会系研究科図書チーム 一般職員から

〈昇任〉

R6.4.1	石田 唯	附属図書館柏地区図書課資料管理チーム	係長 (物性研図書室担当)	附属図書館柏地区図書課資料管理チーム主任(物性研図書室担当)から
--------	------	--------------------	------------------	----------------------------------

# 令和5年度外部資金の受入について

## 1. 奨学寄附金

件数	金額(円)
17	49,620,000

## 2. 受託研究

研究題目	委託者	受入金額(円)	研究代表者
フロッケ・エンジニアリングとトポロジカル非線形光学効果の理論	(国研) 科学技術振興機構	17,030,000	機能物性研究グループ 教授 岡 隆史
電子構造のトポロジーを利用した機能性磁性材料の開発とデバイス創成	(国研) 科学技術振興機構	31,041,400	量子物質研究グループ 特任教授 中辻 知
トポロジカル磁性体のスピントロニクス技術の開発	(国研) 科学技術振興機構	10,010,000	ナノスケール物性研究部門 教授 大谷 義近
時空間で精密制御した輻射場による表面反応プロセス	(国研) 科学技術振興機構	11,960,000	機能物性研究グループ 教授 吉信 淳
ゲル・腱・靱帯の構造・ダイナミクスの解明	(国研) 科学技術振興機構	37,700,000	附属中性子科学研究施設 准教授 眞弓 皓一
2次元ホウ素末踏マテリアルの創製と機能開拓	(国研) 科学技術振興機構	84,760,000	附属極限コヒーレント光科学研究センター 教授 松田 巖
AIが先導するオートメーションタンバク質工学の創出	(国研) 科学技術振興機構	114,075,000	機能物性研究グループ 准教授 井上 圭一
オペランド軟X線反応イメージングの開発	(国研) 科学技術振興機構	25,480,000	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
トポロジカル半金属を用いたテラヘルツ高速エレクトロニクス・スピントロニクス素子開拓	(国研) 科学技術振興機構	3,754,400	附属極限コヒーレント光科学研究センター 准教授 松永 隆佑
高強度テラヘルツ光によって誘起された量子スピン流の学理創出	(国研) 科学技術振興機構	5,850,000	物性理論研究部門 特任研究員 玉谷 知裕
異種混合配列オリゴマーによる超高伝導性材料の創製	(国研) 科学技術振興機構	19,760,000	凝縮系物性研究部門 助教 藤野 智子
磁気メモリの革新に向けたスキルミオン物質の開発と機能開拓	(国研) 科学技術振興機構	12,402,000	凝縮系物性研究部門 准教授 高木 里奈
$\pi$ 共役分子の一次元配列を基点とした未来材料検索	(国研) 科学技術振興機構	20,800,000	凝縮系物性研究部門 特任研究員 宮島 大吾
強相関ソフトマターの時空間階層構造解析	(国研) 科学技術振興機構	9,100,000	附属中性子科学研究施設 准教授 眞弓 皓一
2次元結晶ナノ構造の設計原理と量子機能性開拓	(国研) 科学技術振興機構	23,920,000	凝縮系物性研究部門 准教授 井手上 敏也
反強磁性体の多層膜を用いた磁気トンネル接合及びダイナミクスの実験的研究	(国研) 科学技術振興機構	2,600,000	量子物質研究グループ 准教授 三輪 真嗣
パワーレーザーDXプラットフォーム	(大) 大阪大学	4,400,000	附属極限コヒーレント光科学研究センター 教授 小林 洋平
データ連携部会	(国研) 物質・材料研究機構	17,000,001	附属物質設計評価施設 教授 尾崎 泰助
エネルギー貯蔵材料の動作下超高分解能放射光軟X線電子状態解析	(国研) 産業技術総合研究所	5,408,274	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
強相関系の非平衡開放系ダイナミクスと量子情報	(国研) 科学技術振興機構	3,835,000	機能物性研究グループ 助教 沼澤 宙朗
高圧力利用による水素反応の精密解析	(国研) 科学技術振興機構	1,300,000	附属物質設計評価施設 教授 上床 美也
計算科学的方法を用いた高安定性電解液材料の探索	(国研) 科学技術振興機構	1,300,000	機能物性研究グループ 助教 春山 潤
反強磁性体の多層膜を用いた磁気トンネル接合及びダイナミクスの実験的研究	(国研) 科学技術振興機構	0	量子物質研究グループ 准教授 三輪 真嗣
新奇量子物性や革新的電子機能を示す遷移金属化合物の新物質開拓	(国研) 科学技術振興機構	0	附属物質設計評価施設 教授 岡本 佳比古
石炭灰を主原料とした新規なリサイクル連続長繊維の応用研究	(国研) 新エネルギー・産業技術総合開発機構	7,749,000	附属物質設計評価施設 教授 上床 美也





# 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

施設長（教授） 1名

## 2. 所属

物性研究所附属中性子科学研究施設

## 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

附属中性子科学研究施設の施設長として、施設と日本の中性子科学コミュニティ全体の発展に貢献し、将来計画において強力なリーダーシップを発揮するとともに、中性子を用いた独自の物性研究（分野は問わない）を推進する研究者を募集する。

変更の範囲：配置換、兼務又は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方

## 6. 雇用開始日

令和7年4月1日（火）

## 7. 任期および更新の有無

満56歳に達する年度の始めに任期5年の任期制に入り、再任は1回を限度とする。なお、任期制の詳細については下記照会先に問い合わせること

## 8. 試用期間

採用された日から6ヶ月間（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7月31日（水）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（5編）

○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](mailto: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（5編）

○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）





# 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

東京大学物性研究所物性理論研究部門（川畑研究室）

## 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

物性理論。量子物性の基礎的かつ現代的な問題に幅広く取り組み、物性科学における新しい分野の開拓に意欲的な研究者を募集する。物性理論研究部門の川畑所員と協力して、所内外の研究者との連携にも積極的に取り組む研究者を希望する。

変更の範囲：配置換、兼務又は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. 雇用開始日

採用決定後なるべく早い時期

## 7. 任期および更新の有無

任期5年、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7月31日（水）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（3編）

○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](mailto: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（3編）

○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）





## 編集後記

今号の冒頭は、新たな物性研基金を開始したご案内です。物性研における基金自体は、記事の中でも紹介しているように、約1年前に量子物質ナノ構造ラボで開始しております（物性研だより第63巻1号）。物性研でも（？）基金を設立するのは、昨今の大学を取り巻く大きな流れの中であることは違いないですが、これを機会に「物性愛」を育みたいとの所長の思いが綴られています。是非、ご協力頂き「周期表銘板」にお名前を。

研究紹介の1件目は、このところ常連となりつつある眞弓先生のゲルの成果ですが、電解質膜としての性能に着目された研究です。その後は、期せずして、スピン波・マグノンの記事が並びました。どちらも磁場により制御やチューニングを行う研究ですが、益田先生は量子磁性体において、大谷先生はトランスデューサーを作り込んで、スピン波とフォノンの強結合を初めて実現させたもので、PRLのEditors' Suggestionにもなっています。研究紹介の最後は、昨年度着任された林先生の、モータータンパク質の物性評価についての成果です。機能物性研究グループが設置されてから8年が経ちますが、生きている生物の研究が物性研だよりに掲載されるのは初めてだと思います。

その他に、昨年度の外国人客員を含めた6名の客員所員の活動紹介の記事があります。様々な分野から研究者が共同研究に来て頂いており、共同利用研としてのアクティビティにもご協力を頂いることは、この時期に報告書をまとめる立場としてはいつも感謝しております。

鈴木博之

### 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](mailto:issp-kyodo@issp.u-tokyo.ac.jp)