

客員所員

群馬工業高等専門学校電子メディア工学科 塚原 規志

2023 年度に物性研ナノスケール部門にて客員所員を勤めました、群馬高専電子メディア工学科の塚原です。ホストである吉信淳先生、および関係者の皆様に感謝いたします。

私は東大新領域物質系の大学院生として、2002 年から 2007 年まで吉信研究室に在籍しました。その時は、Pt 表面上の吸着 NO 分子の表面拡散に関する研究を行いました。当時、単一吸着分子の振動や反応、スピン励起などが STM で行なわれ、STM を用いた単一分子物性研究に強い関心がありました。学位取得後、東大新領域物質系の川合・高木研究室に研究員・助教として所属し、STM を用いた単一分子スピン物性の研究に従事しました。日本物理学会若手奨励賞(領域 9)を受賞し、この時は、共同研究者に恵まれたと感じたことに加え、吉信研時代を含めたほとんどの成果が実験と数値計算を合わせて得られたもので、自身でも数値計算を行える必要がある、ということでした。これまでの成果では、簡単なモンテカルロシミュレーションや STM-IETS スペクトルの計算は自身でコーディングして計算を行いましたが、DFT 計算は共同研究者任せでした。

川合先生の退官後、マックスプランク研究所、東北大学で研究員として従事し、2019 年 4 月より現職の群馬高専に着任しました。この年より、物性研共同利用で吉信研にて長い間利用者がいなかった低温 STM を動かし始めました。また DFT 計算を始めるべく計算環境を立ち上げ、2022 年から物性研スパコンも利用させてもらっています。

物性研共同利用における最初のテーマとして、ハロゲン
を有する有機分子の間に働くハロゲン結合による分子間の
引力相互作用、およびハロゲン結合の由来であるハロゲン
内の特異な電荷分布に着目しました。この分野であれば、
STMと**DFT**計算を組み合わせて何かできるのではないかと
考えていました。うまく実験・計算結果を論文化できた
後、次のテーマとして多孔性有機薄膜をホストとしたガス

ト吸着原子・分子の吸着構造(薄膜のトラップ機能)を探索する、というテーマを進め、2023 年度、客員所員としてこの研究を進めました。物性研での研究は、吉信先生の研究グループへの参加から寒剤の利用、客員としてはさらに、客員予算にて、国際学会で発表する機会を得たことは、非常に良い経験となりました。

客員所員着任当初の想定とはやや異なった形にはなったものの、この1年間で興味深い実験結果が多く得られました。手元の実験データは現時点で解釈しきれていないものもあり、できるところから論文化するつもりです。また今後も共同利用にて研究を進める予定で、もう少しだけ物性研に出入りすることになりますので、よろしくお願いします。