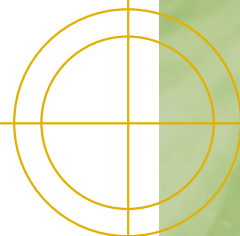


# 機能物性研究グループ

## Functional Materials Group



物性から機能を引き出し利用できるようにするためには、物質の基底状態・平衡状態の静的電子物性を基盤として、励起状態・非平衡状態、さらには化学反応や生体系に至る動的な性質に踏み込む必要がある。近年、励起状態や非平衡状態の時間分解測定、ナノスケールの分析・分光測定、動作・反応中でのオペランド観測などの物性測定法や分光法は飛躍的に進歩した。一方、計算機科学やデータ科学を用いた理論的解析が著しく進展している。物性研究所でもこれらの手法が導入・開発され、先進的な物性研究が行われている。そこで、物性研究所の既存のグループが連携しつつ、新たに取り組むべき分野を具体的に開拓するために、機能物性研究グループが形成された。機能物性研究では、伝統的な固体物性物理が対象としてきた電子・スピン・格子及びそれらの動的過程だけでなく、原子・イオンの移動や原子の組み替え(反応)を含めて、マルチスケール・階層的複合構造をもつ物質システムを扱う。本研究グループでは、重点的な研究テーマに対する共通の関心と相補的な専門技術を有する物性研究所の研究者数名がコアメンバーとなるが、さらに数名の所員が従来の部門に属しつつ本グループの併任として機能物性研究に参加する。

The Functional Materials Group is one of two new trans-divisional and interdisciplinary research groups and deals with excited states and dynamics in systems with hierarchical and inhomogeneous structures, including chemical reactions and dynamical processes in biological systems. Recently, time-resolved spectroscopy of excited states and non-equilibrium states, nano-scale observation and measurement as well as operando spectroscopy/measurement have greatly advanced. Theoretical analysis based on first-principles calculation and data science has achieved a remarkable development. There are already pioneering works done at ISSP along such directions as mentioned above. To get started, several current faculty and staff members of ISSP have been assigned to the core members. The core members are expected to provide seeds of collaboration and organize a research team involving other divisions and facilities as well as researchers outside ISSP. It is particularly important to collaborate with research facilities of ISSP so that their advanced and unique resources can enhance the scientific quality. By taking advantage of being a joint-use/research center, we can always invite external researchers to collaborate on new subjects. The Functional Materials Group should work as an open platform for such collaborations.

教授  
Professor YOSHINOBU, Jun

教授  
Professor AKIYAMA, Hidefumi

教授\*1  
Professor SHIBAYAMA, Mitsuhiro

教授\*2  
Professor KOMORI, Fumio

教授\*3  
Professor MORI, Hatsumi

教授\*1  
Professor YAMAMURO, Osamu

准教授  
Associate Professor SUGINO, Osamu

准教授\*2  
Associate Professor LIPPMAA, Mikk

准教授\*4  
Associate Professor MATSUDA, Iwao

准教授\*5  
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

准教授\*4  
Associate Professor HARADA, Yoshihisa

助教  
Research Associate YOSHIMOTO, Shinya

助教  
Research Associate NOGUCHI, Yoshifumi

助教  
Research Associate HAZAMA, Yuji

技術専門職員  
Technical Associate MUKAI, Kozo

特任研究員  
Project Researcher ITO, Takashi

特任研究員  
Project Researcher KIM, Changsu

特任研究員  
Project Researcher ZHU, Lin

特任研究員  
Project Researcher HIYAMA, Miyabi

特任研究員  
Project Researcher YAMAMOTO, Yoshiyuki

\*1 所内兼務。本務は中性子科学研究施設。/concurrent with Neutron Science Laboratory

\*2 所内兼務。本務はナノスケール物性研究部門。/concurrent with Division of Nanoscale Science

\*3 所内兼務。本務は凝縮系物性研究部門。/concurrent with Division of Condensed Matter Science

\*4 所内兼務。本務は極限コヒーレント光科学研究センター。

/concurrent with Laser and Synchrotron Research Center

\*5 所内兼務。本務は物質設計評価施設。

/concurrent with Materials Design and Characterization Laboratory

# 吉信研究室

Yoshinobu Group



吉信 淳  
YOSHINOBU, Jun  
教授  
Professor



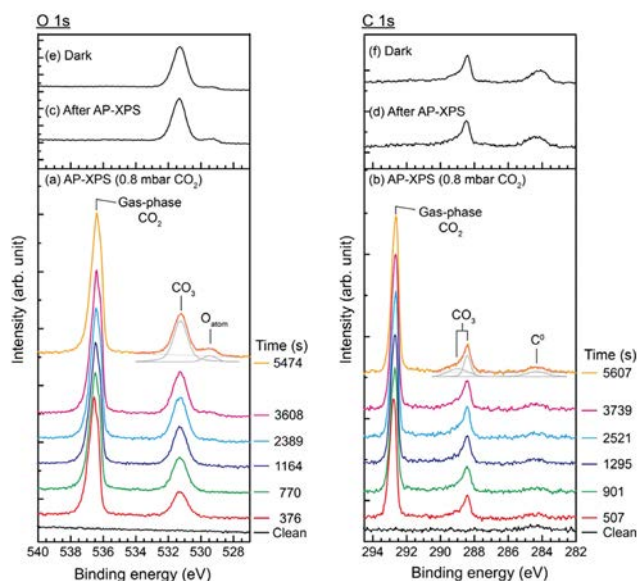
吉本 真也  
YOSHIMOTO, Shinya  
助教  
Research Associate

表面界面の特徴の一つは、バルクの対称性が破れ表面特有の構造や物性が現れることだけではない。外部から原子・分子を自在に表面に供給し、新しい物質を構築する「反応場」であることが最も重要な特徴である。また、表面界面は物質移動の場だけではなく、エネルギー変換の場としても極めて重要である。最近では、原子・分子レベルで制御されたナノスケールの材料（例えば、サイズの整ったクラスター、異方性の強い低次元化合物、配向の特定された分子凝集系など）を作製し、機能を持ったナノ・デバイスを構築することも可能になってきた。原子スケールで物質移動（拡散や反応）を制御し、機能をもつ材料やデバイスを創製するためには、表面・界面における素過程を理解することが不可欠である。表面における原子・分子のダイナミクス研究は、触媒反応・半導体プロセス・分子エレクトロニクスと密接に関連している。当研究室では、表面・界面における原子・分子のダイナミクス（吸着、拡散、成長、脱離）、表面ナノ物質の構築および表面界面の電子物性を、表面振動分光、光電子分光などの表面分光法と、走査型トンネル顕微鏡や独立駆動4探針電気伝導測定法を駆使して研究している。シンクロトロン放射光（KEK-PF、SPring-8 など）を用いた雰囲気中のオペランド光電子分光実験も行っている。

340 K で 0.8mbar CO<sub>2</sub> 雰囲気中における Cu(997) 表面のオペランド光電子分光スペクトル (左) O 1s (右) C 1s [Top. Catal. 59 (2016) 526].

Ambient pressure XPS spectra of Cu(997) in 0.8mbar CO<sub>2</sub> at 340K: (left) O 1s and (right) C 1s [Top. Catal. 59 (2016) 526].

Solid surfaces are intriguing objects, because novel structures and electronic properties emerge as a result of symmetry breaking of bulk. Solid surfaces play an important role as “low dimensional reaction field”, where we can provide atoms and molecules and manipulate them deliberately. In addition, surface and interface are vital in the energy conversion and dissipation processes. In order to fabricate atomically-controlled surface functional materials, we have to understand the dynamical behavior of atoms and molecules on surfaces. The research of these subjects is closely related to the basics of catalysis, semiconductor processes and molecular electronics. We have utilized surface vibrational spectroscopy, photoelectron spectroscopy, scanning tunneling microscopy, independently driven four-probe measurement and etc. in order to investigate structures, reactions and electronic properties of atoms and molecules on surfaces. Synchrotron radiation spectroscopy including operando XPS is used to study electronic states of surface and interface.



## 研究テーマ Research Subjects

1. モデル触媒による小分子の活性化と表面反応の研究  
Activation and surface reaction of small molecules by model catalysts
2. 固体表面における原子・分子の動的過程の研究  
Dynamical processes of atoms and molecules on solid surfaces
3. 半導体および有機薄膜の電子状態と表面電気伝導の研究  
Electronic states and surface conductivity of semiconductor and organic thin film
4. グラフェンやシリセンなど低次元物質の電子状態と反応性の研究  
Electronic states and reactivity of low-dimensional materials on surfaces
5. 雰囲気中の表面化学反応の研究  
Chemical reaction on solid surfaces under ambient conditions

# 秋山研究室

Akiyama Group



秋山 英文  
AKIYAMA, Hidefumi  
教授  
Professor



挟間 優治  
HAZAMA, Yuji  
助教  
Research Associate

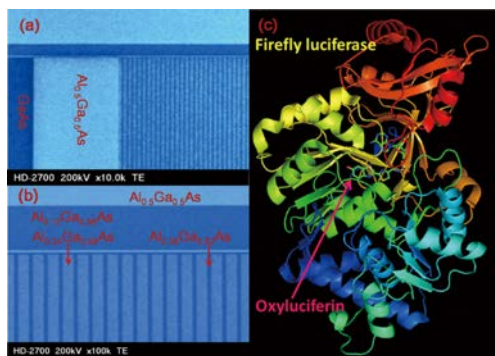
半導体量子ナノ構造の光物性や、ヘテロ構造・ナノ構造に基づく半導体レーザーや太陽電池のデバイス物理、ホタル生物発光の生物物理などを、レーザー分光・顕微分光・光学計測技術を用いて研究している。

半導体レーザーに対して、最大定格を大きく超える励起を短時間だけ加え、極端非平衡状態を生み出し、フェムト秒短パルス発生限界を追及する研究を行っている。人工衛星用高品質 III-V 族半導体タンデム太陽電池の損失機構を調べ、変換効率限界を物理的に理解するデバイス物理研究も行っている。また、世界一細くかつ均一で制御性の高い半導体量子細線レーザーを作製し、量子力学的な光学物性、低次元性、電子正孔系多体問題、半導体レーザー物理、結晶成長、物質科学など様々な興味から研究を行っている。

光学実験技術として、微細なナノ構造の発光を高感度に検出する技術、絶対量を定量計測する技術、ナノ構造の透過吸収を計測する技術、顕微分光や画像計測の技術、ソリッドイメージング顕微技術などを開発している。さらに、それらの技術を応用し、ホタルやクラゲやウミホタルの生物発光やルミノール化学発光などを、生物学・化学・理論の専門家や民間会社と共同で研究している。

100 周期 T 型量子細線レーザー (a,b) とホタルルシフェラーゼ (c) の構造

Nano-structures of a 100 T-shaped quantum-wire laser (a,b) and firefly luciferase protein (c).



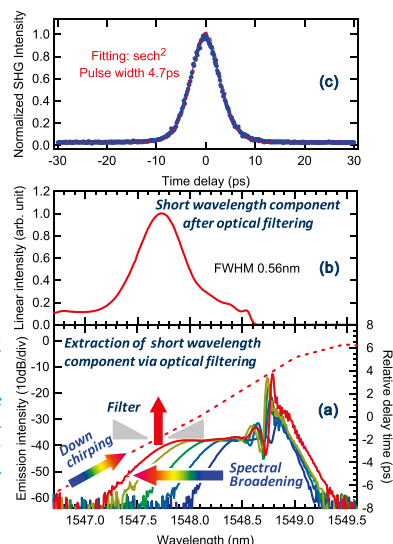
Advanced laser spectroscopy on the basis of lasers and microscopy is developed and applied to semiconductor quantum wires and other nano-structures, in order to understand and control their optical properties quantum mechanically.

Femto-second pulse generation directly from gain-switched semiconductor lasers is studied intensively to understand the pulse dynamics and the shortest-pulse limit. High-quality III-V-semiconductor tandem solar cells and their internal loss rates and mechanisms are also studied. We make the world thinnest and cleanest quantum-wire semiconductor lasers that have superior laser performances such as low threshold currents. Experimental findings and problems provide us fruitful physics subjects related to 1D physics, many-body physics, lasers, solar cells, crystal growth, material science, and semiconductor device physics and engineering.

We are developing experimental techniques such as sensitive luminescence detection, absolute luminescence-yield measurements, transmission/absorption measurements of single nano-structures, micro-spectroscopy, imaging, and solid-immersion microscopy. Some of these techniques have been applied to study of bioluminescence of fireflies, jelly fish, and sea fireflies as well as luminol chemiluminescence.

半導体レーザーからの 4.7 ps パルス直接発生実験

Direct 4.7 ps pulse generation from a gain-switched semiconductor laser diode.



## 研究テーマ Research Subjects

1. 利得スイッチング半導体レーザーおよび太陽電池のデバイス物理  
Device physics of gain-switched semiconductor lasers and solar cells
2. 高品質半導体量子細線および井戸における低次元電子正孔キャリアの多体相関と非平衡性  
Many-body interactions and non-equilibrium properties of low-dimensional electron-hole systems in clean semiconductor quantum wires and wells
3. 半導体量子構造およびデバイスの作製、高品質化、構造評価、顕微分光計測、画像計測  
Material physics and development of high-quality semiconductor nano-structures via microscopy
4. ホタル・クラゲ・ウミホタルなどの生物発光と生物化学発光計測標準  
Bioluminescence of firefly, jelly fish, sea firefly, etc. and bio/chemiluminescence measurement standards

# 杉野研究室

Sugino Group



杉野 修  
SUGINO, Osamu  
准教授  
Associate Professor



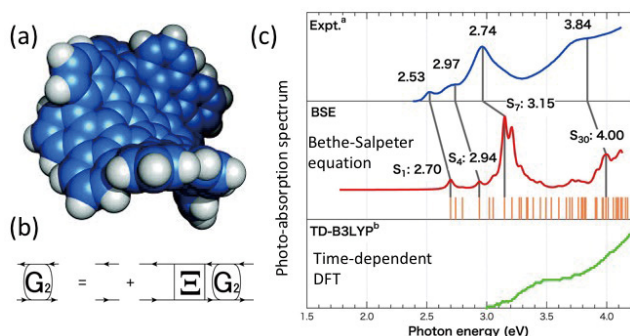
野口 良史  
NOGUCHI, Yoshifumi  
助教  
Research Associate

計算機シミュレーションを用いて、物質の性質を理論的に解明するための第一原理計算を行っている。本研究室ではシミュレーションの対象を拡げるための研究（計算手法開発）と物性を解明するための研究（スーパーコンピュータを用いたシミュレーション）の両面から研究を行っている。

手法開発の対象は、(1) 世界最大級の励起状態計算を可能にするための多体グリーン関数法 (GW + Bethe-Salpeter 法) プログラム開発、(2) 高精度基底状態計算のための、スレーター行列式に基づく従来の体系から反対称ジェミナル積とパフィアン形式に基づいた体系への移行、(3) 化学反応により電位差が生じている界面系の定常状態を求めるための密度汎関数法の構築である。

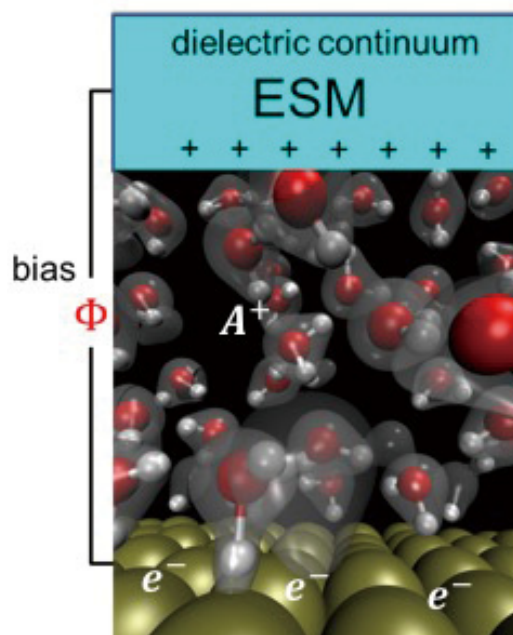
実験とコラボしたシミュレーションも積極的に行い、強磁場下での構造相転移、溶液中での生体分子の安定性、表面薄膜でのディラック電子系、燃料電池電極触媒などの解明を行っている。

Development of first-principles condensed matter theory is the target of study. This is done by advancing computational methods and by performing large-scale simulations. The methodologies under development are (1) the many-body Greens's function approach to the excited states of materials, via the solution of the Bethe-Salpeter equation within the GW approximation, (2) accurate wave function theory based on the antisymmetrized geminal power and the Pfaffian, in place of the conventional Slater determinant, and (3) density functional approach to the non-equilibrium and steady state of the electrochemical interface. Collaboration with experimental research groups is also an important theme. The theme includes (1) structural phase transition of a material under strong magnetic field, (2) thermodynamic stability of bioluminescent material, and (3) Dirac cone of novel thin films grown on surfaces, (4) design of electrocatalyst for the next-generation fuel cell.



炭素ナノ物質（うねったナノグラフェン）の構造と計算された光吸収スペクトル。本計算 (GW + Bethe-Salpeter) は従来の計算 (time-dependent DFT) を改善し、実験と良好な一致を示している。200 原子系での定量的な励起状態計算が可能になった。

Carbon nano-material and photo-absorption spectrum. Our calculation (GW + Bethe-Salpeter equation) improves over the conventional calculation (time-dependent DFT) and yields results comparable to experiment. It has become possible to reliably predict excited states of systems up to 200 atoms.



白金水溶液界面における化学反応と非平衡定常状態  
Electrochemical reaction and non-equilibrium steady state of the platinum-solution interface.

## 研究テーマ Research Subjects

1. GW + Bethe-Salpeter 法に基づく励起状態の第一原理計算  
First-principles calculation of excited states based on GW + Bethe-Salpeter equation
2. 反対称化ジェミナルに基づく高精度波動関数理論  
Accurate wave function theory based on antisymmetrized geminal power
3. 電気化学界面の第一原理計算  
First-principles calculation of electrochemical interface