

# 機能物性研究グループ

Functional Materials Group

物性から機能を捉え、応用に資するためには、基底・平衡状態の物性を基盤として、励起・非平衡状態、さらには反応や生体系に至る動的な対象を理解する必要がある。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・反応中のオペランド観測などの実験法が飛躍的に進歩した。一方、計算・データ科学による理論解析や、フロッケエンジニアリングなど量子非平衡現象のシミュレーション法が著しく進展している。そこで、物性研究所の既存のグループが連携し、新たな研究分野を開拓するため、機能物性研究グループが形成された。これにより電子・スピン・格子及びそれらの動的過程だけでなく、原子・イオンの移動や化学反応、高次複雑分子系などマルチスケールな複合構造をもつ物質系を扱う。重点的な研究課題に関連した物性研究所の研究者数名がコアメンバーとなり、さらに数名の所員が従来の部門に属しつつ併任として参加する。

The Functional Materials Group (FMG) is one of two new trans-disciplinary 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, computational simulation methods for non-equilibrium quantum phenomena such as Floquet engineering have 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 FMG should work as an open platform for such collaborations.

---

グループ主任 井上 圭一  
Leader INOUE, Keiichi

---

# 吉信研究室

Yoshinobu Group

## 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 on model catalysts
- 2 表面や界面における水素が関わる物性と反応  
Properties and reactions of hydrogen at surfaces and interfaces
- 3 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
- 4 THz パルスによる固体表面における原子・分子ダイナミクスの研究  
Dynamical processes of atoms and molecules on solid surfaces using THz pulse



教授 吉信 淳  
Professor YOSHINOBU, Jun

専攻 Course

理学系化学 新領域物質系

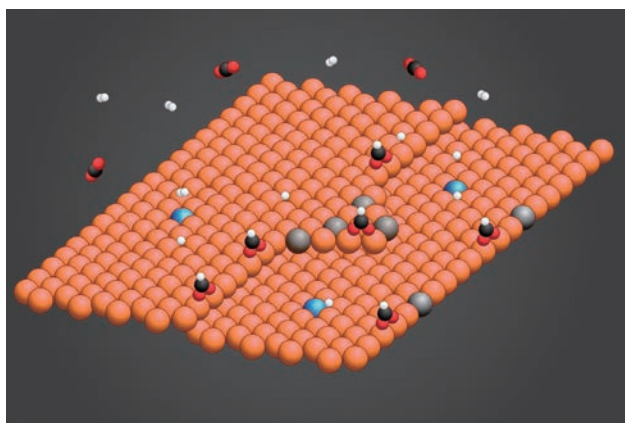
Chem., Sci. Adv. Mat., Frontier Sci.



助教 田中 駿介  
Research Associate  
TANAKA, Shunsuke

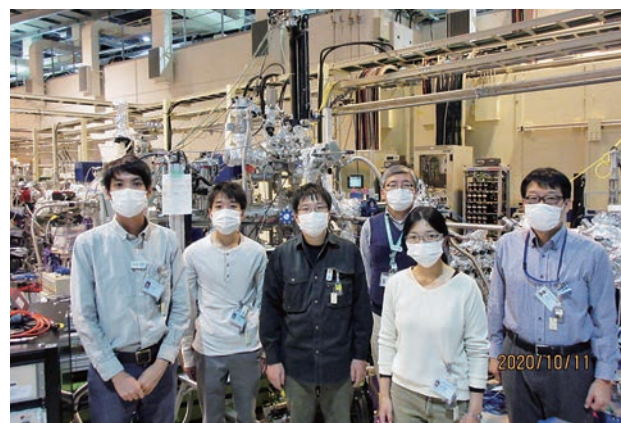
外部から原子・分子を自在に供給し、新しい物質を構築する「反応場」であることが、固体表面の最も重要な特徴である。表面・界面は物質移動の場だけではなく、エネルギー変換の場としても重要である。原子スケールで物質移動を制御し、機能をもつ材料やデバイスを創製するためには、表面・界面における素過程を理解することが不可欠である。表面における原子・分子のダイナミクス研究は、触媒やデバイスだけでなく、さらに地球環境や宇宙における化学反応についても手がかりを与えてくれる。当研究室では、表面・界面における原子・分子のダイナミクス、モデル触媒および低次元材料の構造・物性・反応を、振動分光、光電子分光、走査型トンネル顕微鏡や独立駆動4探針電気伝導測定法を駆使して研究している。また、シンクロトロン放射光を用いたオペランド光電子分光を推進している。最近、THzパルスによる表面プロセス駆動のプロジェクトにも取り組んでいる。

Solid surfaces play an important role as “low dimensional reaction field”, on which we can provide atoms and molecules and manipulate them deliberately. In addition, surface and interface are vital in the energy conversion processes. In order to fabricate atomically-controlled 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. In addition, we can simulate chemical reactions on cosmic dust and clouds in atmosphere with laboratory experiments in ultrahigh vacuum at low temperature. We have utilized surface vibrational spectroscopy, photoelectron spectroscopy and local probe methods in order to investigate structures, reactions and electronic properties of atoms/molecules and thin films on surfaces. Synchrotron radiation (KEK-PF, SPring-8 etc.) is also used to study electronic structure of surface and interface, including *operando* X-ray photoelectron spectroscopy. Recently, we have engaged in the study of THz-pulse driven surface processes.



Pd-Zn-Cu モデル触媒における CO<sub>2</sub> の水素化反応

A schematic model of CO<sub>2</sub> hydrogenation on a Pd-Zn-Cu model catalyst



SPring-8 BL07LSU の雰囲気光電子分光システムと実験チーム

Ambient pressure X-ray photoelectron spectroscopy system at BL07LSU of SPring-8 and our team



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshinobu\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshinobu_group.html)

# 秋山研究室 Akiyama Group

## 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 ホタル生物発光と発光計測標準  
Firefly bioluminescence and luminescence measurement standards



教授 秋山 英文  
Professor AKIYAMA, Hidefumi

専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.



助教 小林 真隆  
Research Associate  
KOBAYASHI, Masataka

半導体量子ナノ構造の光物性、半導体レーザーや太陽電池のデバイス物理、ホタル生物発光などを、レーザー分光・顕微分光・光学計測技術や半導体結晶成長・微細加工を用いて研究している。

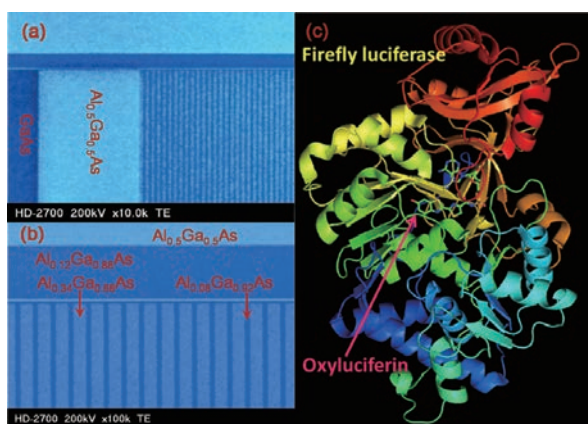
半導体レーザーに対して、極端に強い励起を短時間だけ加え、極端非平衡状態を生み出し、フェムト秒短パルス発生限界を迫る研究、人工衛星用の多接合太陽電池の損失機構を調べ変換効率限界を物理的に理解する研究、高品質な半導体量子構造の量子力学的な光学物性、低次元性、電子正孔系多体問題、半導体レーザー物理、結晶成長、物質科学の研究などを広い興味から行っている。

光学実験技術として、微弱発光を高感度検出する技術、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を開発している。それらの技術を応用し、ホタル生物発光や生物学課題を、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。

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.

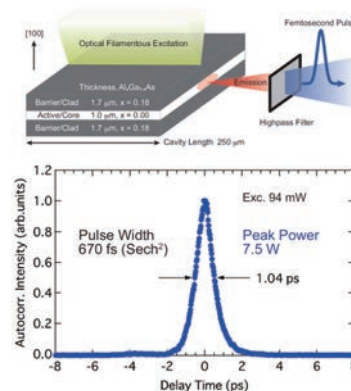
Pico- and femto-second pulse generation directly from gain-switched semiconductor lasers is studied intensively to understand the pulse dynamics and the shortest-pulse limit. High-quality III-V-semiconductor tandem solar cells and their internal loss rates and mechanisms are also studied. We make the 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.



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).



利得スイッチ半導体レーザーからのフェムト秒パルス発生

Direct fs pulse generation from a gain-switched semiconductor laser.





# 杉野研究室 Sugino Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 固液界面の第一原理シミュレーションと電池・燃料電池の科学  
First-principles simulation of solid-liquid interfaces and science of batteries and fuel cells
- 2 機械学習や補助場などの新規手法を用いた高精度密度汎関数理論の構築  
Development of novel density functional theory based on machine learning and auxiliary field
- 3 物質中の水素原子・プロトン・ヒドリドの量子動力学  
Quantum dynamics of hydrogen, proton, and hydride ion in materials
- 4 電子格子相互作用の高精度計算による新規物質相の予測  
Accurate calculation of the electron-phonon coupling and prediction of novel phase of materials



教授 杉野 修  
Professor SUGINO, Osamu

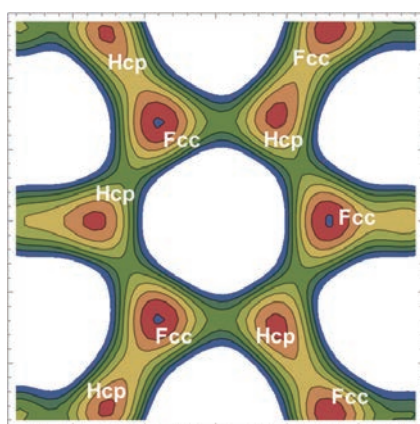
専攻 Course  
理学系物理学  
Phys., Sci.



助教 春山 潤  
Research Associate  
HARUYAMA, Jun

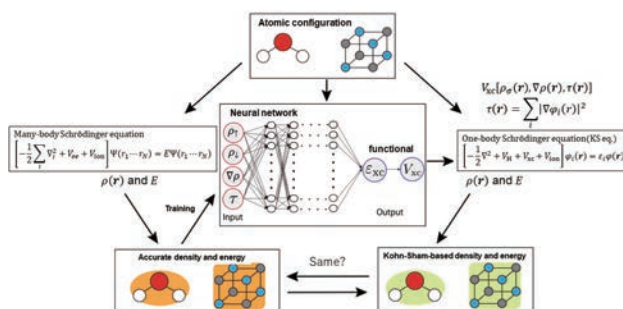
物質が示す多様な性質や現象を、電子と原子核が従う基本方程式を数値的に解く(シミュレーションする)ことにより解き明かす研究を行っている。この研究分野は第一原理計算と呼ばれ、物理学のみならず化学や生物学、材料科学など様々な分野にまたがって発展している。本研究室では、シミュレーション手法の基礎となる多体理論(主に密度汎関数理論)を開拓する研究と、固体や液体を含む様々な物質の物性をスーパーコンピュータを用いて明らかにする研究を並行して行っている。計算対象は、エネルギー変換などに関連する電池や燃料電池、物質中での水素原子と電子がカップルした量子動力学、ホタルの発光物質、新規物質の構造や物性の予測などであり、最近機械学習を援用した研究を行っている。物性研究所内の実験グループとの共同研究も進めている。

This group studies properties and phenomena of various materials by numerically solving the basic equations, such as Schrödinger equation, that electrons and nuclei follow. This research field is called first-principles calculation and has been widely developed in physics, chemistry, biology, and materials science. Owing to the development of supercomputers and the simulation packages, material simulations are recently done with increasing reality. This group has been contributing to this field by (1) the development of computational many-body theory, mainly based on the density functional theory, and (2) the large-scale material simulations done on ISSP- and Fugaku supercomputer. The topic includes the energy conversion process occurring in batteries and fuel cells, the quantum dynamics of hydrogen coupled with electron, the bioluminescence process of firefly, solid oxygen, bandgap renormalization, cuprates and so on. Owing to tight collaboration with experimentalists and availability of machine learning methods, this group has put special focus on the prediction of new material properties.



白金上の水素原子の分布の第一原理計算。水素原子は、被覆率が1に近い場合には古典粒子的に局在して分布するが、低密度では図のように量子粒子的にFccサイトとHcpサイト上にまたがって分布する。

First-principles calculation of hydrogen atom on a platinum surface. Hydrogen atoms distribute like a classical particle when the coverage is close to one, while they are delocalized over the Fcc and Hcp sites under the lower coverage conditions because of the quantum effect as shown in the figure.



機械学習法を用いた密度汎関数理論の構築。少数分子系の密度とエネルギーを機械学習することにより高精度密度汎関数理論が作成することが可能になった。

Completing the density functional theory with the machine-learning technique. Only by machine learning the density and energy of a few molecules, it is made possible to construct the exchange-correlation potential of high accuracy.



# 岡研究室 Oka Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 量子物質のフロケ・エンジニアリング  
Floquet engineering of quantum materials
- 2 非平衡量子系の相転移現象の基礎研究  
Phase transitions in nonequilibrium systems
- 3 生体現象、情報物理への場の理論の応用  
Application of field theory to biology and information physics



教授 岡 隆史  
Professor OKA, Takashi

専攻 Course

理学系物理学  
Phys., Sci.

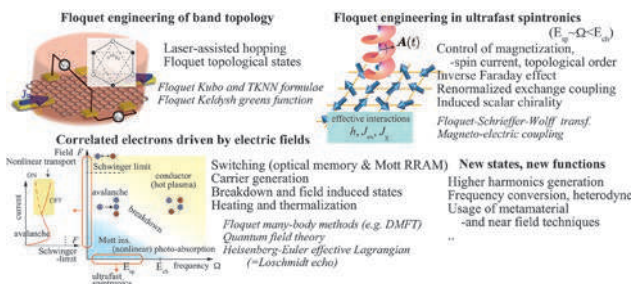


特任助教 沼澤 宙朗  
Project Research Associate  
NUMASAWA, Tokiro



特任助教 奥村 駿  
Project Research Associate  
OKUMURA, Shun

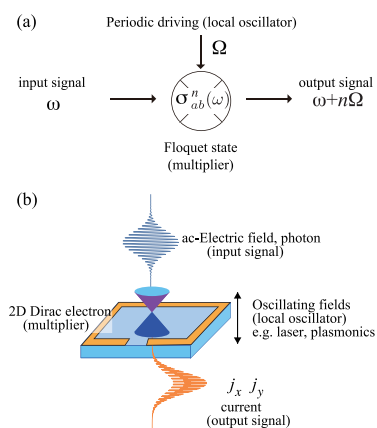
量子物質の非平衡状態に潜む未知の自然法則を発見するとともに、その理解をもとに物質相を自在に制御し機能発現させる方法を理論的に研究する。中でもフロケ・エンジニアリングに代表される新しい理論体系が近年注目を集めており、非平衡現象を平衡系に近い深さで理解することが可能になりつつある。さらに乱流、ニューラルネットワークといった古典物理や、生命現象、日常的に非平衡現象が利用されてきた半導体物理などの分野で蓄積されてきた知見を参考にしつつ、場の理論や数値計算などの基礎的な手法を利用することで関連電子系、トポロジカル物質、スピン系などの重要な量子物質（左図）の非平衡現象の研究をおこなっていくとともに、物質の新しい非線形応答効果（例えば右図）を探索する。



量子物質のフロケ・エンジニアリングの広がり。バンドトポロジー、スピン秩序、相関電子系などの相制御や新原理に基づくデバイスの提案につながっている。

Floquet engineering in quantum materials. T. Oka, S. Kitamura, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 10, 387-408 (2019).

Our main research subject is quantum materials driven far away from equilibrium by external fields such as laser light. The aim is to seek for new laws of physics that govern such exotic states and to find a way to control their collective dynamics. We employ new theoretical frameworks such as Floquet engineering which enables us to understand nonequilibrium physics with the depth comparable to equilibrium systems. We can also obtain important insights from other existing research fields such as turbulence, neural network, and non-linear semiconductor optics, and apply them to new exotic quantum materials. The target materials range from topological systems to strongly correlated systems (left figure). New non-linear response phenomena such as the heterodyne Hall effect (right figure), i.e. quantum Hall effect induced by oscillating magnetic fields, will be studied as well. We are also interested in problems outside of the traditional condensed matter physics, such as chemical reaction networks in biological systems and information theory.



フロケ状態を利用したヘテロダイン・デバイス。(a) 入力信号に対して周波数混合の施された出力を与える。(b) 振動磁場を用いたヘテロダインホール効果の実現例。

Heterodyne device utilizing Floquet states. (a) Frequency mixed output is realized. (b) A realization of the heterodyne Hall effect using 2D Dirac semimetals.



## 井上研究室 Inoue Group

## 研究テーマ Research Subjects

- 1 光受容型膜タンパク質ロドプシンの分子機能メカニズムの機能解析および分光研究  
Functional and spectroscopic studies on the mechanism of molecular function of photoreceptive membrane protein, rhodopsins
- 2 先端的分光計測法の生体分子研究への応用  
Application of advanced spectroscopic measurement method for biomolecular study
- 3 ゲノムビッグデータをもとにした新奇光受容型タンパク質探索  
Exploration of novel photoreceptive proteins through use of genome big data
- 4 機械学習法を用いた生体分子の機能決定因子の同定とそれらにもとづく新規機能性分子開発  
Machine-learning study on the determining factor for the function of biological molecules and its application for the development of novel functional molecules



准教授 井上 圭一  
Associate Professor INOUE, Keiichi

専攻 Course

理学系化学 新領域物質系

Chem., Sci. Adv. Mat., Frontier Sci.



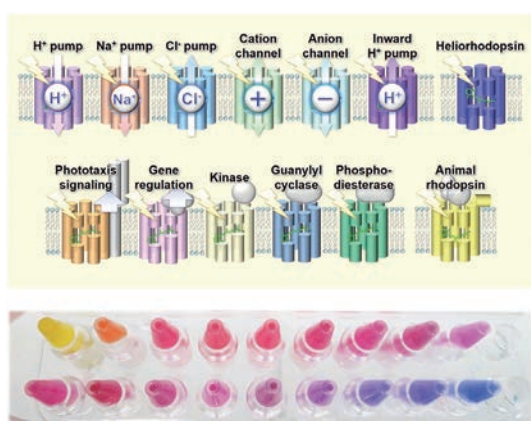
助教 永田 崇  
Research Associate  
NAGATA, Takashi

多くの生物は太陽光を自身の生理活動のためのエネルギー源や、外界の環境変化を覚知するための情報源として利用する。そしてこのときに中心的な役割を果たすのが、様々な光受容タンパク質である。

本研究室では、それら多様な光受容タンパク質の機能発現メカニズムを統一的に明らかにすることを目的とし、レーザー時間分解分光実験や振動分光実験などを通じて、高次複雑系である光受容タンパク質分子の化学反応素過程を調べる研究を行っている。さらに電気生理学実験や、生化学的手法と組み合わせることで、原子・分子レベルから細胞・個体レベルにおよぶ多階層的な理解を目指している。またこれらの知見をもとに、光遺伝学などの応用を目標とした機能性生体分子の開発にも取り組む一方で、近年のゲノム解析の発展に伴うビッグデータをもとに、新奇な光生物学的現象とそれに関わる分子群の探索研究や機械学習法の開発を行っている。

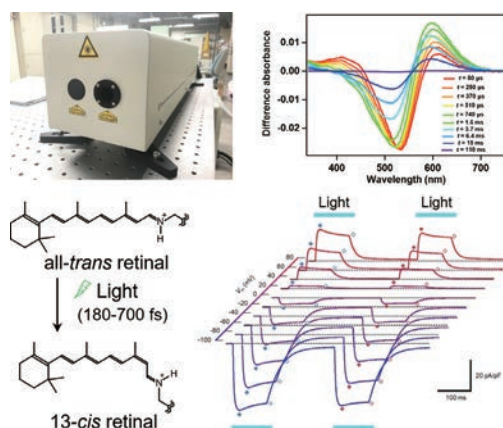
Most living organisms use sun-light as energy source for their biological activity and information source to recognize environmental change. In this photobiological events, a wide variety of photo-receptive proteins play the central role.

Our research aims unified understanding of the mechanism of biomolecular functions of various photoreceptive membrane proteins called "rhodopsins". The chemical elementary process of these supra complex photoreceptive proteins is studied by time-resolved laser spectroscopy and vibrational spectroscopy, and we are promoting further research by combining biochemical and electrophysiological techniques to achieve multi-layer understanding from atomic and molecular to cellular and individual levels. Furthermore, whereas we are developing novel artificial biomolecules for the application to optogenetics and so on based on the fundamental insights, exploration studies of new photobiological phenomena and related molecular groups, and a development of machine learning technology are being conducted with big data accompanying the development of genome analysis in recent years.



多様な機能を持つ微生物型ロドプシン（上）とその精製タンパク質試料（下）。

Microbial rhodopsins with a variety of functions (upper) and the purified-protein samples (lower).



ナノ秒パルスレーザーによる微生物型ロドプシンの過渡吸収測定（上）およびロドプシン分子内におけるレチナールの光異性化過程（下）。

Transient absorption measurement of microbial rhodopsin by a nano-second pulsed laser (top) and photo-isomerization process of retinal in rhodopsin (bottom right). Photo currents of ChR expressed in mammalian cells.



[https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/inoue\\_group.html](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/inoue_group.html)



# 陳研究室

Chen Group



外国人客員教授 陳 少強  
Visiting Professor CHEN, Shaoqiang

ハロゲン化鉛ペロブスカイト (LHP) は、太陽電池とレーザー・LED 発光素子の両方で有望視される新材料である。レーザー発振は、ナノワイヤまたはナノロッドのファブリペロー型共振器や、微小球、板、キューブのウィスパリングギャラリモード (WGM) 微小共振器で報告されているが、レーザー発振やその他の光学特性に関する励起子の寄与など基本メカニズムの多くが未解明である。華東師範大・陳グループでは、一段スピコート合成法で高品質有機無機 LHP 薄膜を、液相法や CVD 法で多様な LHP 微結晶 / ナノ構造を作製し、レーザー発振を観測してきた。これらの現象の物理機構を理解するため、利得スペクトル計測、レーザーのデバイス化と特性評価、時間分解分光測定による超高速スペクトルダイナミクス計測などを、物性研にて行う。それらの実験から、励起子効果を含むペロブスカイトナノ / マイクロ結晶のレーザー物理を解明する。

Lead halide perovskites (LHPs) are currently stimulating huge activity across the field of optoelectronics for both light-harvesting and light-emitting applications. Lasing operations have been reported in a number of LHP micro-/nanostructures, such as microspheres, microplates, and microcubes by forming the whispering gallery mode (WGM) microcavities. These results demonstrate the high optical gain of LHPs and their considerable potential for applications in nonlinear optics. However, underlying mechanisms are controversial. We formed obtain high-quality LHP thin films by one-step spin-coating method, and synthesized various kinds of LHP micro/nanostructures through efficient liquid-phase and chemical vapor deposition (CVD) methods. These samples have shown single- and/or multi-longitudinal laser emissions.

Aiming to understand in depth mechanisms of the above mentioned phenomena, we perform in ISSP characterization of material gain, optical device fabrication and lasing characterizations, and investigation of ultrafast spectral dynamics with time-resolved spectroscopy measurements.

