# 機能物性研究グループ

**Functional Materials Group** 

機能物性研究グループは、生体現象や、化学反応、駆動された量子物質とナノデバイス等において実現する多彩な非平衡多体現象について俯瞰的な立場から研究を進めることで、その隠れた学理と未知の機能を解き明かし応用に資することを目的とする。近年、光遺伝学や細胞内物性計測、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・分光測定などの実験法が飛躍的に進歩し、同時に、計算・データ科学による理論解析や、揺らぎの定理やフロッケ・エンジニアリングなど非平衡統計力学の構築が進展している。これら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 a trans-divisional and interdisciplinary research group aimed at unraveling the underlying principles and unknown functionalities of diverse non-equilibrium many-body phenomena. These phenomena manifest in biological processes, chemical reactions, driven quantum materials, and nanodevices. The group conducts comprehensive research to contribute to the understanding and practical application of these phenomena. In recent years, there have been significant advancements in experimental techniques such as optogenetics, intracellular measurements, time-resolved measurements of non-equilibrium excited states, and spectroscopic measurements at the nanoscale. At the same time, there have been notable developments in computational and data science, as well as in non-equilibrium statistical mechanics. Several ISSP researchers join FMG as core members, while other members participate as concurrent members. Moreover, as a joint-use/research center, FMG actively invites external researchers to collaborate on new subjects, serving as an open platform for such collaborations.

グループ主任 井上 圭一 Leader INOUE, Keiichi

### 秋山研究室 Akiyama Group

#### 研究テーマ Research Subjects

- 1 利得スイッチ短パルス半導体レーザーと超高速非平衡非線形の光物性
  - ${\sf Gain\text{-}switched}$  short-pulse semiconductor lasers and ultrafast non-equilibrium non-linear optical physics
- 2 半導体レーザーデバイス・モジュール・システムの開発と応 用
  - Development and applications of semiconductor-laser devices, modules, and systems  $\,$
- 3 宇宙用の先端太陽電池の高効率エネルギー変換と詳細平衡限 界物理
  - $\mbox{High-efficiency energy conversion}$  and detailed-balance-limit physics in advanced space solar cells
- 4 発光計測標準、ホタル生物発光、ロドプシン・ラマン分光 Luminescence measurement standards, firefly bioluminescence, rhodopsin Raman spectroscopy





助教 小林 真隆 Research Associate KOBAYASHI, Masataka

教授 秋山 英文 Professor AKIYAMA, Hidefumi

専攻 Course 理学系物理学 Phys., Sci.

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追及する研究、宇宙用の先端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科学課題を、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。

理論の専門家や民間会社と共同で研究している。

(a)

(b)

HD-2700 200kV x10.0k TE
(b)

Alos Gaos AS

Alos Gaos AS

Alos Gaos AS

Alos Gaos AS

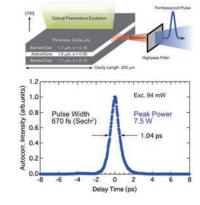
100 周期 T 型量子細線半導体レーザー (a,b) とホタルルシフェラーゼ (c) の構造

Nano-structures of 100 T-shaped quantum-wire semiconductor 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.

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 space 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, microspectroscopy, 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.



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.



# 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 proteins, rhodopsins
- 2 先端的分光計測法の生体分子研究への応用 Application of advanced spectroscopy for biomolecular study
- 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 using genome big data
- 4 機械学習法と実験自動化を用いた生体分子の機能決定因子の 同定とそれにもとづく新規機能性分子開発 Identification of functional determinant factors of biomolecules and

the development of novel functional molecules using machine learning methods and experimental automation







特任助教 加藤 善降 Project Research Associate KATO, Yoshitaka

准教授 井上 圭 Associate Professor INOUE, Keiichi

専攻 Courses

理学系化学 新領域物質系

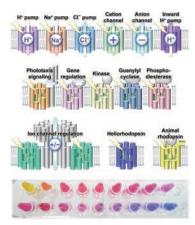
Chem., Sci. Adv. Mat., Frontier Sci.

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、外界の環境変化を知覚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、多様 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並びに実験自動化法の開発 を行っている。

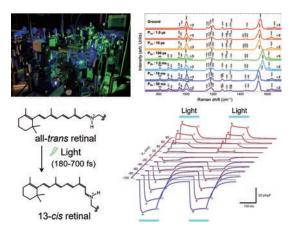
Most living organisms use sun light as energy source for their biological activity and information source to recognize environmental change. In this photobiological events, a wide variety of photoreceptive proteins play the central role.

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 cellar 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 developments of machine learning technology and experiment automation methods 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).



独自光学系によるロドプシンの時間分解共鳴ラマン分光(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(左下)。ホ乳類細胞に発現させた チャネルロドプシンの光電流(右下)。

Time-resolved resonance Raman spectroscopy of rhodopsin using the original optical system (top) and photo-isomerization process of retinal in rhodopsin (bottom left). Photo currents of ChR expressed in mammalian cells (bottom right).



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/inoue\_group.html

### 岡研究室 Oka Group

#### 研究テーマ Research Subjects

- 量子物質のフロッケ・エンジニアリング Floquet engineering of quantum materials
- 2 量子多体系の非平衡状態 Nonequilibrium states in quantum many-body 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







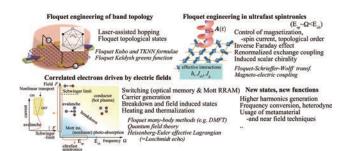
特任助教 チャウダリー スワティ Project Research Associate CHUDHARY, Swati

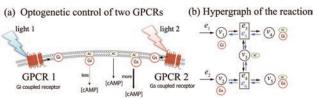
教授 岡 隆史 Professor OKA, Takashi

専攻 Course 理学系物理学 Phys., Sci.

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。中でもフロッケ・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相関電子系、トポロジカル物質、スピン系などの重要な量子物質の非平衡現象の研究をおこなっていくとともに、化学反応ネットワークや生物系における情報理論など、伝統的な凝縮系物理学の範疇外の問題にも興味を持っている。

Our primary research focus around studying quantum materials driven far from equilibrium by external fields. Our objective is to discover new fundamental laws of physics that govern these exotic states and explore methods to control their collective dynamics. To achieve this, we employ innovative theoretical frameworks like Floquet engineering, which allows us to comprehend nonequilibrium physics at a similar depth as equilibrium systems. Additionally, we draw valuable insights from other research fields such as turbulence, neural networks, and nonlinear semiconductor optics, and apply them to investigate new exotic quantum materials. Our target materials encompass a wide range, including topological systems and strongly correlated systems. We will also investigate novel nonlinear response phenomena, such as the heterodyne Hall effect, wherein the quantum Hall effect is induced by oscillating magnetic fields. Furthermore, we have a keen interest in exploring problems beyond traditional condensed matter physics, such as chemical reaction networks in biological systems and information theory.





量子物質のフロッケ・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).

フロッケ・エンジニアリングの光遺伝学への応用と生体内情報伝達ネットワー ク制御

Application of Floquet engineering to optogenetics and control of cell signalling.



## 杉野研究室

### Sugino Group

#### 研究テーマ Research Subjects

- 固液界面のシミュレーションと燃料電池応用 Simulation of solid-liquid interfaces and fuel cell application
- 物質中の水素・ミュオンの量子状態 Quantum states of hydrogen and muon in a material
- 3 電子格子相互作用の第一原理計算 Electron-phonon couplings from first principles
- 4 超伝導体の第一原理計算 First-principles simulation of superconductors



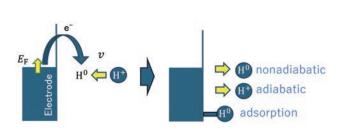
教授 杉野 修 Professor SUGINO, Osamu

専攻 Course 理学系物理学

Phys., Sci.

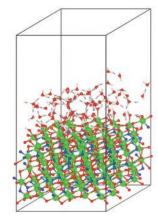
密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算は、機械学習に基づく予測精度や物質予測能力の向上が見られている。本研究室では第一原理計算を用いて、エネルギー変換や超伝導などに関わる物質機能性に関する研究を行っている。例えば水の電気分解反応や燃料電池反応の最適な触媒を発見するために、ZrO2やTiO2等の候補材料の表面構造を網羅的にモンテカルロサンプリングし、反応経路や活性化エネルギーの予測を行っている。同時に非平衡動力学法を用いて、プロトンによる還元過程の量子論的解明を目指した研究も並行して行っている。その際カギとなるのは、電子格子相互作用の正確な第一原理予測であり、非摂動論的な手法の構築を目指した研究も行っている。電子格子相互作用計算の典型的応用として、BCS型超伝導研究が挙げられるが、ここでは複雑な構造を持つ物質を対象に、構造と磁性、超伝導転移温度の関連に関する物質科学的な研究を行っている。

First-principles calculations based on Density Functional Theory (DFT) have considerably improved the accuracy of predictions and the ability to predict materials with help of machine learning. In this lab, first-principles calculations are used to study material functionalities related to energy conversion and superconductivity. For example, to find optimal catalysts for water electrolysis and fuel cell reactions, we perform extensive Monte Carlo sampling of the surface structures of candidate materials such as ZrO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub> to predict reaction pathways and activation energies. In parallel, we are conducting a non-equilibrium kinetics study to elucidate the quantum theory of the electrocatalytic reduction process. Key to this study is the accurate first-principles prediction of the electron-lattice interactions, and we are also working on the construction of a non-perturbative method for this purpose. A typical application of electron-lattice interaction calculations is the study of BCS-type superconductivity, where we investigate materials with complex structures and the relationship between structure, magnetism and superconducting transition temperature.



燃料電池反応の非平衡動力学計算。金属表面でプロトンに電極電子が移動して 反応が進行する過程を調べている。

Nonequilibrium study of fuel cell process. We are simulating the process where a proton accepts an electron from the electrode to proceed subsequent reaction.



ドープされたジルコニア上の水のシミュレーション。第一原理計算と機械学習の組み合わせにより長時間シミュレーションが可能になった。

Simulation of liquid water interfaced with a doped zirconia surface. The first-principles calculation was extended to long-term simulation owing to the machine learning technique.



 $https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/main contents/organization/labs/sugino\_group.html \\$ 

### 林研究室 Hayashi Group

#### 研究テーマ Research Subjects

- 1 ヒトiPS 運動ニューロン内の軸索輸送の蛍光顕微鏡観察 Fluorescence observation of axonal transport in iPS cell derived neuron
- 2 ナノスプリングによるモータータンパク質キネシンの力計測 Force measurement of motor protein kinesin by using a nano-sized spring
- 3 極値統計学を用いた神経細胞軸索輸送の速度解析 個体内 *in vivo* イメージング Extreme value analysis applied to axonal transport by motor proteins
- 4 神経細胞軸索輸送に起因するシナプス形成異常の理論モデル 構築

Theoretical modeling of synapse formation related to axonal transport



教授 林 久美子 Professor HAYASHI, Kumiko

専攻 Course

新領域複雑理工学

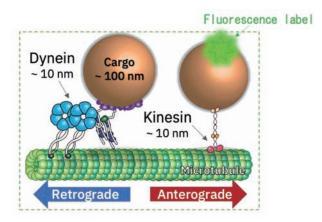
Complex. Sci. and Eng., Frontier Sci.

磁性、超伝導、スピントロニクスなどの固体物理分野を対象とした物性計測だけでなく、生体、特に細胞を対象とした物性計測も細胞内現象のメカニズムを理解するために重要である。生きている、つまり外部からエネルギー注入があり内部でエネルギー消費がある細胞は複雑な非平衡環境にあり、統計力学法則が破綻するため、最も物性計測が難しい対象と言える。

本研究室では蛍光顕微鏡観察をベースに細胞内現象に対して、力・速度・エネルギーなどの物理量を正確に計測する技術を開発する。顕微鏡などのハード部分だけでなく非平衡統計力学、数学や情報科学などを駆使したソフト面の改善を行う。測定量を元に細胞内現象の理論モデルを構築し、細胞内現象を物理として定量的に理解する。神経疾患などの病気の理解に役立て、医学への貢献を目指す。

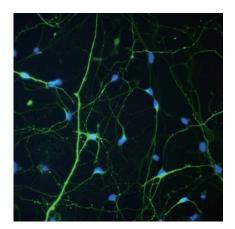
Precise physical measurements are important for cells to understand molecular mechanisms occurred in cells to maintain life activities as well as for solid state materials. However, *in vivo* measurements are difficult because intracellular environments are complex non-equilibrium states and crowded with various proteins and organelles, in which theories of equilibrium statistical physics are often violated. Because physical measurements are often based on theorems of equilibrium statistical physics, the violation of the theorems is serious problem.

In our lab, we develop techniques to precisely measure physical quantities such as force, velocity and energy for proteins and organelle inside cells, based on fluorescence microscopy. We think development of analytical methods (software) using non-equilibrium statistical physics, information science and mathematics is significant as well as development of microscopes (hardware). We also aim to understand cellular phenomena quantitatively by constructing theoretical models using the measured physical quantities. We hope such theories can contribute to the understanding of neurological disorders particularly.



神経細胞内の物質輸送。モータータンパク質 (順行輸送:キネシン、逆行輸送:ダイニン) によってシナプスの材料が輸送される。

Material transport in the axon of a neuron (anterograde transport: kinesin, retrograde transport: dynein). Synaptic cargos are transported by motor proteins.



ヒトiPS 由来ニューロンの蛍光イメージング Fluorescence imaging of human iPSC-derived neurons

