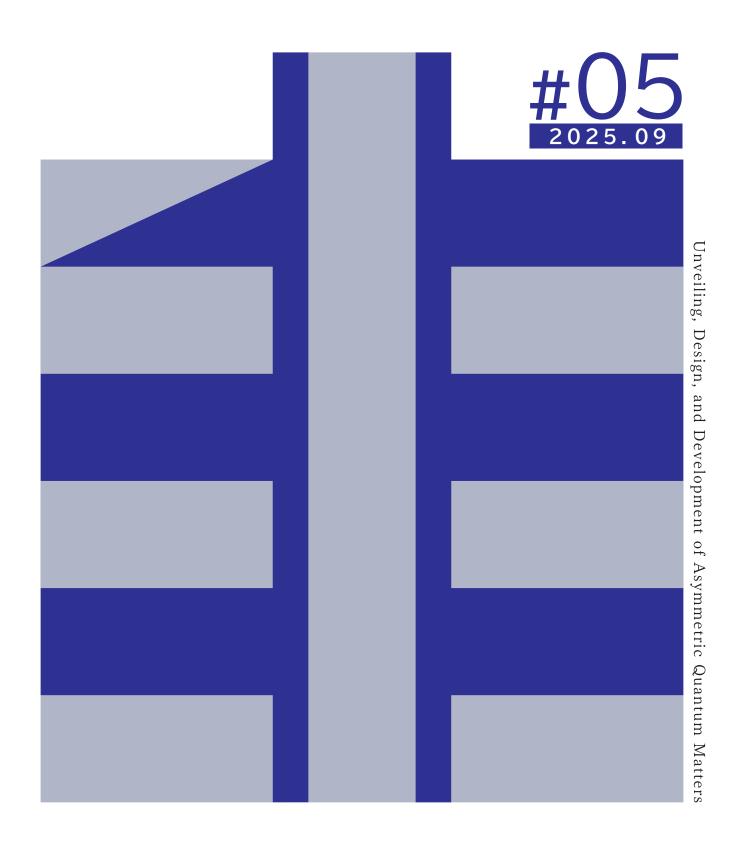
ASYMMETRY

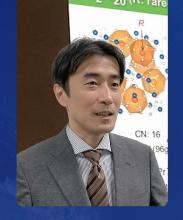
NewsLetter





CONTENTS

巻頭言		
News Letter第 5 号 巻頭言	鬼丸 孝博	01
解説 ————————————————————————————————————		
カイラルな調和ポテンシャル中の電子	服部 一匡	02
対称性を用いたワニエ有効模型の構築について	是常 隆	04
今号の研究成果 ――――――――――――――――――――――――――――――――――――		
スピン軌道結合系物質Caslr3O12における電流誘起による抵抗履歴現象と異方的格子歪・	松平 和之	09
若手紹介 ————————————————————————————————————		
Research Topic: Electric toroidal order and novel phase transition in quantum materials	Sheetal Devi	14
局在自由度の素励起から多極子の物理へ	小山 慎之介	16
磁性・対称性・機能性を結ぶ研究を目指して	川又 雅広	17
広島大学 磁性物理学研究室 & 自身の研究紹介	渡邉 寛大	18
学会・研究会		
トピカルミーティング「量子ビームでプローブする 新しい磁性状態の可視化:手法開発と物性」	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	20
トピカルミーティング「精密計測×アシンメトリ量子物質:	芳賀 芳範	21
トピカルミーティング 「アシンメトリ量子物質の新展開:多極子のスケールシームレス化に向けて」	┈┈ 松田 達磨	22
トピカルミーティング「Workshop on theory ofcross correlations, multipoles, and computational material design」 @ 御殿場	大同 暁人	24
コラム・報告		
受賞ニュース		25
A I は量子物質の夢を見るか?	一 石渡 晋太郎	27
山梨とカイラリティ ~右と左の不思議~	大原 繁男	29
アシンメトリから生まれたセレンディピティ?	── 柳澤 達也	37
「極低温で軟かくなる人工ダイヤモンド」 アシメ★通信	<u>.</u>	39
/ マハ 東 週 旧		39
スキル相伝	∞ + +3	40
共鳴X線回折を用いたEu化合物の磁気秩序の観測	鈴木 大斗	40
キャパシタンス式ファラデー法によるホルミウム系化合物の極低温磁化測定		40
高エネルギー光電子分光による高圧合成白金酸化物のバルク電子構造の解明		41
職人技に触れた超音波実験	小田 一瑛	41
事務局からのお知らせ		
2025年10月からの関連行事	······································	42
事務局からのお知らせ		43



News Letter第5号 巻頭言

領域代表

鬼丸 孝博

広島大学大学院先進理工系科学研究科 教授

News Letter第5号の発行に際し、「アシンメトリ量子」の5年間の活動もちょうど中間点を迎えます。領域としての活動が進んでいくなかで、領域全体会議やトピカルミーティングで領域内外のメンバーが直接会って意見を交換し、また議論を交わすなどの交流の機会が増え、計画研究と公募研究の連携による「多極子」を使った挑戦的な共同研究も進んできました。集束イオンビーム (FIB)加工装置 (共用装置として日本原子力研究開発機構に令和6年度に設置済み) にて微細加工した単結晶を用いた測定では、高い電流密度とドメイン選択に対する有用性がみえてきており、今後の活用がますます期待されます。また、擬カゴメ構造などの特徴的な対称性に着目した物性の系統的な理解に向けた取り組みも進んでおり、多極子を生かすための対称性に着目した量子物質の開発は加速しています。これから研究期間の後半を迎えるにあたり、アシンメトリが彩る量子物質の可視化と設計、そして新たな機能物性を示す量子物質の創出を目指して、本領域の活動を推進してまいります。

はじめての試みとして、5月22日にオンライン交流会を開催しました。本研究領域で進めている研究や諸活動の 進捗状況、それらを踏まえた今後の計画について情報共有しました。後半のフリートークでは、オンラインにもかか わらず活発な意見交換がありました。それまでの対面による交流があったからこその有意義な時間になったと思い ます。その中で提案のあった「ランチ交流会」を先日開催し、さっそく共同研究に向けた新たな連携も始まっていま す。6月11日には、山梨県立図書館にて市民講演を開催しました。大原先生による「山梨とカイラリティ~右と左 の不思議~」の講演では、参加した市民の方々も食い入るように聴いておられるようでした(本号の別記事を参 照)。市民の方々との交流を通して、アウトリーチ活動の重要性を改めて認識する機会となりました。続けて、6月 12 - 13日のトピカルミーティングでは、有機化合物、無機・有機ハイブリッド化合物、メタマテリアルを専門とす る幅広い分野の方々にも講演を依頼し、本領域で掲げている「広い空間スケールを有するアシンメトリ量子物質」 を開発するための方策について議論し、また意見交換する貴重な場となりました(本号の別記事を参照)。

分野間交流という点では、学術変革領域研究(A)「極限宇宙」との共催で、9月1-3日に京都大学基礎物理学研究所にて、「高次にもつれた量子相探索の展開」と銘打った研究会を開催します。また、10月12-17日には、クロアチアにて国際ワークショップ ICSCQMを共催します。これらの機会を通して、本領域のこれまでの成果を国内外に発信したいと考えています。今年度の領域全体会議は、来年1月6-8日に、名古屋工業大学にて開催します。第 I 期の公募研究の成果報告を兼ねており、来年度に行われる中間評価と残り2年間の活動指針の策定を見据えた重要な会議と位置付けられます。

本領域では、若手研究者の育成を重要視しています。その一環として、博士課程学生・若手研究者の海外派遣 (~3ヶ月)を行っています。博士に進学する M2 学生の応募を可として対象を広げ、総括班から旅費等を支援します。また、スキル相伝プログラムを活用した大学院生・若手研究者の派遣についても、ぜひ活用ください。

本領域の活動に関するご意見やご提案は、secretariat@asymmetry.hiroshima-u.ac.jpまでお寄せください。



カイラルな調和ポテンシャル中の電子

服部 一匡 東京都立大学 准教授

近年、「キラル」、「カイラル」という言葉が物性物理分野でも頻繁に聞かれるようになりました。一切の鏡映対称性が「破れきった系」としてのカイラルな系では、エーデルシュタイン効果、CISSや円二色性など、外場に対して選択的な応答を示すことから、応用も含めて研究が爆発的に発展しているところです[1]。本稿では、最先端の研究とは離れて、学部で習うような、より基礎的な量子力学の演習問題の例として、カイラルな1電子のポテンシャル問題を紹介したいと思います。以下、 $h/2\pi=1$ とします。

早速ですが、以下のような中心が渦巻いてz軸方向に螺旋を描く調和ポテンシャルを考えましょう:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^{2} \left[(x - X(z))^{2} + (y - Y(z))^{2} \right], \quad (1)$$

$$X(z) = d\cos\left(\frac{2\pi z}{l}\right), \ Y(z) = d\sin\left(\frac{2\pi z}{l}\right).$$
 (2)

ここで、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ は電子の座標、X(z)、Y(z) は調和ポテンシャルの「あるzにおけるxy平面内の中心位置」を表します。中心位置(X, Y)はz軸からdだけ離れ周期lで螺旋を描き、 $V(\mathbf{r})$ の等エネルギー面は図1のようになります。運動エネルギーも考慮すると、1電子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(r), \tag{3}$$

となります。 $p_{x,y,z}$ は運動量、m は電子の質量です。

ポテンシャルは若干複雑に見えますが、円柱座標系では見通しが良くなります。X(z)、Y(z)の中の正弦、余弦を指数関数で表し、 $x=\rho\cos\phi$ 、 $y=\rho\sin\phi$ を用いると、 $V(r)=m\omega^2\rho^2/2+V_{\rm tr}(\rho,\phi,z)+$ 定数、

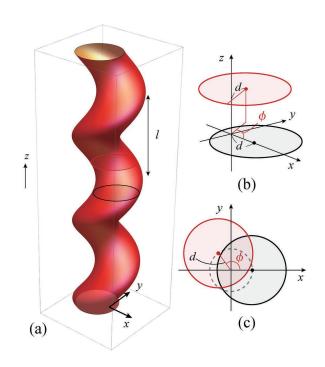


図1 (a) V(r)の等エネルギー面。(b) (a)に示した二つの断面の詳細。(c) 正のz軸上から見た図。

$$V_{\rm tr}(\rho,\phi,z) = -\frac{1}{2} m\omega^2 d\rho \left[e^{i\phi} e^{-iGz} + e^{-i\phi} e^{iGz} \right], (4)$$

となることがわかります。 $G = 2\pi/l$ はz方向の逆格子ベクトルです。すでに気づいた読者もいるかもしれませんが、式(4)の第二項は角運動量と運動量のz成分 L_z , p_z をそれぞれ+1, -G変化させる(およびその逆)ことがわかります。このことは、電子の「並進運動量~電流」が「角運動量(従ってスピン軌道結合があればスピンs)」に変換されることを表しています(V_{tr} のtrはtransferの意)。対称性の観点からは、この系の無限小の螺旋対称性[2]

$$z \to z + \delta z, \quad \phi \to G \delta z,$$
 (5)

により、 $P = p_z + GL_z$ が保存量になっていることから も理解できます。螺旋により無限小の並進対称性は 消失していますが、z軸まわりの適切な角度の回転を 組み合わせると無限小変換(5)が対称操作になるわ けです。

ハミルトニアン(3)は「z方向の自由電子」+「二次元調和振動子 H_{2d} 」+ V_{tr} の形になっています。基底として、z方向の平面波 $\exp(i\ p_z\ z)$ 、 H_{2d} の固有関数 $\Phi_{S,Lz}$ (ρ , ϕ)を取るのが正攻法です[3]。ここで、 $S_z = L_z$ /2として構成されるSU(2)擬スピンSを導入すると、 H_{2d} の固有状態は基底状態からS=0, 1/2, 1, 3/2, …で、エネルギー固有値は $\omega(2S+1)$ となります。つまり、2S は調和振動子のフォノンの数に対応します。通常の並進対称性 $z \to z + l$ を考慮し、第一ブリルアン域内の波数k ($-\pi \le k\ l \le \pi$)とバンドの指標 α を用いるのが便利です。 $P=p_z+GL_z$ が保存することと、通常の意味での周期ポテンシャルが無いことから、エネルギー固有状態は、m, Lを整数として以下の形になることがわかります:

$$\psi_{kL}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = e^{ikz} \sum_{S,m} c_{kL,Sm}^{(\alpha)} e^{iGmz} \Phi_{S,L-m}(\rho,\phi).$$
 (6)

この表示では、保存量はP = k + GLとなります。 V_{tr} は 座標の一次、つまりフォノンの数を1つだけ変える効果を持っているため、 H_{2d} の隣り合うSとS±1/2の固有状態間にのみ行列要素を持っています。また、Sとmの和は独立に取れず、 $-S \le (L-m)/2 \le S$ に注意してください。係数 $C^{(\alpha)}_{kL,Sm}$ と固有エネルギー $\varepsilon_{k\alpha}$ はシュレーディンガー方程式を解くことで求めることができます[4]。

この系には、d, l, $σ = (mω)^{-1/2}$ の3つの特徴的な長さスケールがあります。系の性質はこれらの2つの比である程度決定されることになります。図2(a)には

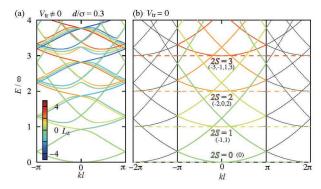


図2: $I/\sigma=4$ の場合の低エネルギー分散。 (a) $d/\sigma=0.3$ 、(b)拡張ブリルアン域内での $V_{tr}=0$ のエネルギー分散。色は L_z [ただし(b)では、 $L_z \ge 0$ の色]、括弧内の数字は縮退した状態の L_z の値、破線は H_{2d} の固有エネルギーを表す。

 $d/\sigma=0.3$ の場合の第一ブリルアン域内のエネルギー分散、(b)には $V_{tr}=0$ としたもの(空格子近似)を描いています。ここで、(a) (b)ともに $l/\sigma=4$ としました。 (a)と(b)を比較すると、(L_z , p_z)の状態が(L_z-1 , p_z+G), (L_z+1 , p_z-G)と混成している様子がわかると思います。また、第一ブリルアン域境界の波数 $kl=\pi=-\pi$ での縮退は、非共型対称性のある系特有の性質として知られています[5]。

以上、簡単にカイラルな調和ポテンシャル問題の解を紹介してきました。ここでは詳細に記述できませんでしたが、z方向の磁場との結合によりバンドが「シフト」することや、電流と角運動量の相関などのカイラルな系に特有の性質を、比較的簡単に垣間見ることができます。スピン軌道相互作用については、 $s\cdot(\nabla V(r)\times p)$ の形の相対論的補正を摂動的に考慮することができます。その表式も、式(1)から極めて簡単な形になることが見て取れます。興味のある人は実際に計算して確認してみるのも良いのではないでしょうか。

$$\Phi_{S,L_z}(\rho,\phi) \propto \rho^{|L_z|} e^{iL_z\phi} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right) L_{2S}^{(|L_z|)} \left(\frac{\rho^2}{\sigma^2}\right).$$

03

^{[1] &}quot;物質科学におけるカイラリティ",固体物理特集号11,565 (2024).

^[2] A. A. Eremko and V. M. Loktev Phys. Rev. B 88, 165409 (2013).

^[3] ラゲールの陪多項式*L*(x) を用いると、

^[4] 実際に計算する際は、ラゲールの陪多項式を用いるよりも、フォノンの基底を用いる方が容易かもしれません.

^[5] M. S. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio, "Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter" (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008).



対称性を用いた ワニエ有効模型の構築について

是常 隆

東北大学理学研究科 教授

はじめに

対称性を用いた交差相関などの機能開拓を目指した理論研究を行う上では、対称性を正しく反映したハミルトニアンを構築することが非常に重要となります。本稿では、その基盤となる、対称性を考慮したワニエ有効模型の構築に関連して、近年整備を進めている symWannier と呼ばれるコード[1,2]について、手法の概略や使い方、利用例を交えて紹介します。

ワニエ有効模型に対称性を考慮する方法はこれまでもいくつか提案されてきており、大きく分けると2通りのやり方、すなわち、初めから対称性の制約のもとで構築する方法[1,3,4]と、あとからハミルトニアンを対称化する方法[5,6]があります。しかし、あとから対称化する方法ではバンドが微妙にずれてしまうため、前者の方法の方が理想的であると考えられます。ワニエ有効模型の構築のためのコードとして広く用いられているWannier90[7]には、前者の方法での実装[3]がなされていますが、利用するための条件が厳しく[8]実際にはあまり用いられてきませんでした。一方、今回紹介する symWannier では、Wannier90が活用できるほぼあらゆる条件のもとで、Wannier90の拡張機能として、組み合わせて使うことができます。 symWannierでは、ワニエ有効模型の構築過程において、対称性を最大限に活用するように設計されており、このコードを用いることで、

1.対称性の導入による計算の高速化(従来比で約2~10倍)

2.対称性と整合するワニエ関数およびホッピングパラメータを備えた有効模型の構築

が実現できます。既存のWannier90のワークフローとも高い互換性を保っており、計算の高速化、という面だけでもquantum ESPRESSOベースでWannier90を利用しているあらゆるユーザーにとってメリットがあるコードになっています。コードの最新の情報は、symWannierのウェブサイト[2]やESPRESSO Tutorialのページ[9]も参照してください。

対称性を用いたワニエ有効模型の構築の流れ

実際の利用例を紹介する前に、まず、対称性を考慮したワニエ有効模型の構築について簡単に説明します。 ワニエ有効模型の構築の目的は、あるエネルギー範囲で第一原理計算(DFT)のバンド構造を再現するような強 束縛模型 (tight-binding ハミルトニアン) を構築することにあり、そのハミルトニアンは、次のような形で記述 されます。

$$H = \sum_{im,jn} t_{im,jn} c_{im}^{\dagger} c_{jn} + h.c.$$
(1)

ここで c_{lm}^{\dagger} は、格子サイト R_i における軌道mに対応するワニエ関数 w_m $(r-R_i)$ を生成する生成演算子です。このワニエ関数は、ブロッホ関数 ψ_{nk} (r)を用いて以下のように定義されます。

$$w_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \sum_n \int d\mathbf{k} \ U_{mn,\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}$$
 (2)

ここで、ワニエ関数をうまく局在させるためには、ブロッホ関数を適切に線形結合する必要があります。この線形結合を担うのが $U_{mn,k}$ であり、この行列を決定することが、ワニエ有効模型の構築に対応するということになります。なお、バンドが1本だけの場合でもバンド計算によって得られる $\psi_{nk}(r)$ には位相の自由度があることから、波数kごとに適切な位相を取る必要があります。

この行列を最適化するために、Marzariらは、

$$M_{mn}(\mathbf{k}, \mathbf{b}) = \langle u_{m,\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{b}} \rangle \tag{3}$$

$$A_{mn}(\mathbf{k}) = \langle \psi_{m\mathbf{k}} | w_n^0 \rangle \tag{4}$$

を用いる手法を提案しました[10]。ここで、 u_{nk} はブロッホ波動関数の周期部分を、bはkメッシュで隣のk点を指すベクトルを、 w_n^n は求めたいワニエ関数に近い原子軌道などの初期状態を表しています。この $M_{mn}(k,b)$, $A_{mn}(k)$ を一様なkメッシュ上で計算できれば、それを用いて最適な $U_{mn,k}$ を決めることができます。したがって、対称性を用いてワニエ有効模型を構築するとは、 $M_{mn}(k,b)$, $A_{mn}(k)$ を対称性を利用していかに高速に計算するか、また、 $U_{mn,k}$ を決める際にいかに対称性からくる制約を課すか、という問題になります。

一般に対称性を用いて計算を高速化させる際には、既約なk点(対称性によって互いに変換可能な重複点を排除したk点の集合)を用意し、可約なk点(重複を含む全てのk点の集合)上のデータを既約なk点の情報から復元します。例えば、〈 u_{mk} | \hat{o} | u_{nk} 〉といった期待値を計算するのであれば、既約なk点での値と可約なk点での値は、演算子 \hat{o} を対称操作で変換することで容易に結びつけられます。同様にして、 $A_{mn}(k)$ についても、対称操作に対してワニエ関数がどう変換するかが分かれば、可約なk点上の値を復元できます。一方、 $M_{mn}(k,b)$ の場合、 $M_{mn}(k,b)$ を既約なk点(と全てのbでの組み合わせ)で計算したとしても、可約なk点での $M_{mn}(k,b)$ を直接得ることはできません。これは、既約なk点上の u_{mk} と u_{nk+b} を、可約なk点とは限らない、というのも問題を複雑にしています。そのため、従来のコードでは、まず可約な全てのk点上で u_{mk} を求めた上で、 $M_{mn}(k,b)$ を計算する、という方法が採られていました。そこで我々は、可約なk点上での $M_{mn}(k,b)$ が、既約なk点上の $M_{mn}(k,b)$ と〈 u_{mk} | \hat{g} | u_{nk} 〉(\hat{g} は波数を変えない対称操作)を組み合わせることで計算できることを示し、そのアルゴリズムの実装を行いました。これにより、既約なk点上の計算のみから $M_{mn}(k,b)$ を再構築できるようになり、計算コストを大幅に削減することが可能になりました。今回の実装では、時間反転対称性なども考慮できるというこえば非磁性体ならどんなに対称性の低い物質でも計算するk点数を半分(計算コストも半分)にできるというこ

とになります。

一方、 $U_{mn,k}$ に対して制約を課すには、(2)式の両辺に対称操作を作用させた式を考える必要があります。その際、ワニエ関数およびブロッホ関数がそれぞれどう変換されるか、を予め計算しておくことにより、 $U_{mn,k}$ がどう変換されるかを求めることができます。この変換の情報は、得られたtight-binding模型に対して対称操作を作用させたときに、ハミルトニアンがどう変化するかを解析する上でも有用な情報となります。

symWannierの利用方法

次に、実際の計算の流れを簡単に紹介します。まず、quantum ESPRESSOとWannier90を用いた従来の方法では、以下の手順で計算を実行します。

```
pw.x < scf.in

pw.x < nscf.in

wannier90.x -pp prefix

pw2wannier90.x < pw2wan.in

wannier90.x prefix
```

各コマンドの詳細は[9]を参照してもらえればと思いますが、ここで重要なのは、nscf.inには可約なk点を入力する必要がある点です。この可約なk点の計算、および、pw2wannier90.xによる $M_{mm}(k,b)$ の計算が、計算コストの大部分を占めることになります。一方、symWannier を使う場合、nscf.in に既約なk点を入力し、pw2wan.in に irr_bz = .true. というオプションを追加して、以下のように実行します。なお、このオプションはquantum ESPRESSOのv7.3以降に実装されており、symWannier自身は pip でインストールできます。

```
pw.x < scf.in

pw.x < nscf.in

wannier90.x -pp prefix

pw2wannier90.x < pw2wan.in

symwannier wannierize -S prefix
```

このように従来の方法とほぼ同じ手順で対称性を考慮したワニエ有効模型を構築することができます。また、計算の高速化だけを利用し、従来のWannier90を利用したいのであれば、pw2wannier90.xのあとに

```
symwannier expand prefix
wannier90.x prefix
```

として、Wannier90を利用することもできます。以上のようにWannier90のユーザーであれば、ほとんど何も変更することなく利用可能な設計になっています。

対称性を考慮したワニエ有効模型の検証

最後に、対称性を用いたワニエ有効模型について検 証していきます。まず、図1に従来の方法とsymWannier で計算したNbのバンドを図示します。これをみると、い ずれの手法でもフェルミ準位以下のバンドをよく再現し ており、このスケールでは全く区別がつかないことがわ かります。そこで、対称性がどの程度保持されているか 確認するため、図1の矢印で示したΓ-Pライン上の対 称性から縮退しているバンドに着目します。この縮退し た2つのバンドの実際のエネルギー差をプロットしたの が、図2になります。Wannier90でも誤差は非常に小さ いことが分かりますが、ワニエ模型作成に利用した点 (Г点、P点、ГとPの中間の点)では、正しくDFTの結 果を再現して縮退していることから分かるように、この 誤差は模型が対称性を満たしていないことに起因する ものになります。一方、symWannierでは、誤差は 10-13eVのオーダーであり、これは数値誤差の範囲で一 致している、ということができます[11]。

以上のことは、ハミルトニアンを直接多極子展開して みても議論することができます。実際、ホッピングのパ ラメータは多極子の基底を用いて、

 $H = \sum_i z_i \mathbb{Z}_i$ のように展開できます[12,13]。ここで、 \mathbb{Z}_i はホッピングを多極子展開したときのそれぞれの基底を、 z_i はその係数を表しています。対称性を完全に満

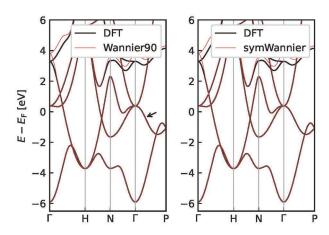


図1. Nbのバンド計算におけるDFTとWannierの, symWannierの比較

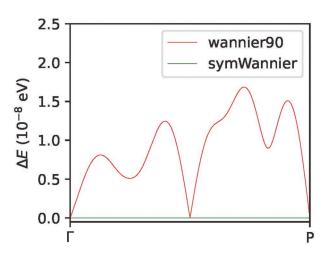


図2. 図1の矢印で示した縮退している2つのバンドのエネルギー 差

たしたハミルトニアンであれば、非磁性の場合、 \mathbb{Z}_i として A_{1g} 表現のみで表現できることになります。そこで、MultiPie[13]を用いて多極子を生成してハミルトニアンを展開し、 A_{1g} 表現以外の係数をみてみると、Wannier90で得られたハミルトニアンには、 A_{1g} 以外の Z_i として 10^{-8} eVオーダーの寄与があるのに対し、symWannierで得られたハミルトニアンには、 10^{-13} eVオーダーの寄与しかないことが分かりました[14]。これは図2の結果ともよく整合しており、symWannierで構築されたワニエ有効模型が対称性を高精度に保持していることが分かります。

07

最後に

今回紹介した対称性を考慮したワニエ有効模型の構築は、第一原理計算ベースで物性を議論する様々な計算の土台になるものと考えています。ワニエ有効模型関連では、計算の自動化[15]、クーロン相互作用の評価 [16]、f電子系におけるワニエ有効模型の構築[17]、磁化に対する項の抽出[18]、CPAの適用[19,20]など様々なプロジェクトを進めていますが、今回の手法はいずれにおいても重要な役割を果たすと考えており、今後もその重要性が増していくと期待されます。インターフェースや機能の改善も継続的に進めていきますので、是非多くの方々に本手法をご活用いただければ幸いです。

謝辞

本研究に繋がる議論をしていただいた有田亮太郎氏、野村悠祐氏、また実装に関して議論していただいた、G.Pizzi氏、J. Qiao氏、J.-M. Lihm氏らWannier90の開発者に感謝いたします。本研究の一部は、齋藤寛人氏との共同研究です。本研究は、日本学術振興会科学研究費助成事業(22K03447,23H04869)およびJST未来社会創造事業(JPMJMI20A1)の支援を受け実施されました。

- [1] T. Koretsune, Comp. Phys. Comm. 285 108645 (2023).
- [2] https://github.com/wannier-utils-dev/symWannier
- [3] R. Sakuma, Phys. Rev. B 87 235109 (2013).
- [4] R. Oiwa et al. arxiv:2501.10056.
- [5] D. Gresh et al. Phys. Rev. Mater. 2 103805 (2018).
- [6] G.-X. Zhi et al, Comp. Phys. Comm. 271 108196 (2022).
- [7] G. Pizzi et al. J. Phys. Condens. Matter 32 165902 (2020).
- [8] スピン軌道相互作用やノンコリニア状態が扱えない、エンタングルしたバンドに対して、あるエネルギー範囲を再現する(frozen windowを指定する)といったことができない、といった問題があります。
- [9] http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~koretsune/SATL_qe_tutorial/
- [10] N. Marzari and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 56 12847 (1997).
- [11] 文献[1] ではWannier90の誤差がもっと大きくなっていますが、これは古いバージョンのquantum ESPRESSO(v6.6)において $A_{mn}(k)$ をつくる際に問題があったことが原因で、v7.2からは修正されています。
- [12] H. Kusunose et al, Phys. Rev. B 107, 195118 (2023)
- [13] https://github.com/CMT-MU/MultiPie
- [14] H. Saito and T. Koretsune, in preparation.
- [15] https://github.com/wannier-utils-dev/cif2qewan
- [16] K. Kurita et al. Comp. Phys. Comm. 292 108854 (2023).
- [17] R. Yamada and T. Koretsune, in preparation.
- [18] H. Saito and T. Koretsune, Comp. Phys. Comm. 305 109325 (2024).
- [19] N. Ito et al. Phys. Rev. B 105 125136 (2022).
- [20] S. Namerikawa and T. Koretsune, J. Phys. Soc. Jpn. 94 044703 (2025).



スピン軌道結合系物質Ca₅Ir₃O₁₂における 電流誘起による抵抗履歴現象と異方的格子歪

松平 和之

九州工業大学大学院工学研究院 教授

はじめに

C02班では、「アシンメトリ量子物質の開拓」を テーマとして、取り組んでいます。本稿では、最近の 成果として、イリジウム酸化物Caslr₃O₁₂における電流 によって誘起される新規な物性について紹介します。

背景説明

まず5d 遷移金属イリジウム酸化物Caslr₃O₁₂について説明します。室温での結晶構造は空間反転対称性の破れた六方晶(P-62m、No.189)です(図1)[1-8]。 歪んだIrO₆ 八面体(図1(c))が辺共有でc 軸方向に一次元鎖を形成しています。この1次元鎖がCa イオンを中心とした3回対称性を持ち、c軸に垂直なc面内でIr の部分格子が三角格子を形成しています。これらのIr サイトは全て等価であり、組成式よりIr の価数は+14/3の中間価数となります。この中間価数状

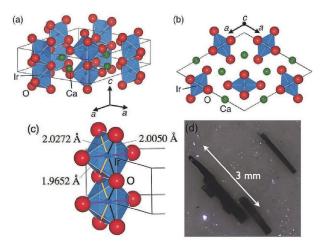


図1 Ca₅Ir₃O₁₂の結晶構造

(a) 辺共有した IrO_6 の1次元鎖 (b) c面内の構造 (c) IrO_6 の局所構造。 $IrkiO_6$ の八面体中心からはズレた位置にある (d) フラックス法により得られた針状単結晶試料 (長軸がc軸方向)。

[K. Matsuhira, K. Nakamura, Y. Yasukuni, Y. Yoshimoto, D. Hlrai, and Z. Hiroi, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 013703 (2018).]

態は放射光¹⁹³lr メスバウアー分光で確認されています[4]。lr イオンは酸化物では主に4 価または5 価をとり、この中間価数状態はlr⁴⁺(5d⁵)とlr⁵⁺(5d⁴)が1:2 の割合からなっていると考えられます。

Caslr₃O₁₂は半導体的電気伝導(VRH伝導)を示し、 105 Kで電気トロイダル秩序による二次相転移を示し、7.8 Kで磁気相転移を示します[1-3,5-8]。この磁気相転移の秩序変数は、193lr メスバウアー分光から磁気双極子秩序ではないことが示唆されており[9]、現在、秩序変数の解明に向けた研究を進めている状況です。

非線形伝導

2016年にフラックス法による単結晶育成に成功 し、GM冷凍機にてc軸方向の電気抵抗を冷却しなが ら測定している際に、印加電流を小さくすると抵抗値 が大きくなることに気付きました。単純な自己発熱で はないと直感しました。その後、半導体的伝導に起 因した自己発熱の効果を避けるために、パルス電流 を用いたI-V特性を調べました。そのパルス電流の 遅延時間依存性から非線形伝導が本質的な振る舞 いであることが結論されました[3]。その後、非線形 伝導はAC電流による応答をロックインアンプを用い て確認され、高調波応答の観測にも成功しています [10]。この非線形性は、室温以下の幅広い温度域で 観測されています。

電流誘起の抵抗履歴

2020年冬に電気抵抗の温度変化の電流依存性を 測定するという実験を計画し、当時、飛び級での大

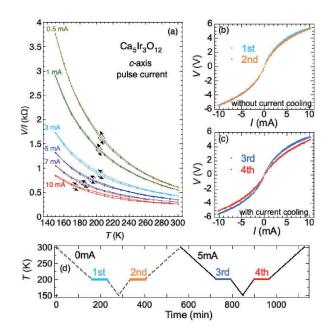


図2電気抵抗とIV特性における温度履歴

測定は自己発熱の影響を無視できるパルス電流法により行った。 (a) 電気抵抗の温度変化の電流依存性、IV特性における温度履歴における電流印加(b)無しの場合(c)と有りの場合(d)(b)と(c)のIV特性測定時の温度履歴

[M. Hayashida, T. Hasegawa, K. Kadohiro, H. Hanate, S. Kawano, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 104704 (2024).]

学院進学予定で早期配属していた学部3年の林田さん(現、京セラ)の研究テーマとしました。そうすると、「どうも抵抗値に履歴がある」という結果報告があり、その詳細を調べてみました。

パルス電流を用いた c 軸方向の電気抵抗の温度変化の電流依存性を図2に示します。電流を印加するとV/Iが小さく非線形性を示すことがよくわかります。また、温度の下げ上げで履歴が現れることが判りました。各電流での温度スイープは往復7.2時間であり、緩和時間が長いことを示唆しています。なお、150-300 Kで抵抗履歴がみえており、105 Kの相転移とは直接関係がない現象と考えられます。

電流誘起の局所構造の変化

中村らによる第一原理計算からCaslr₃O₁₂の電気伝導性はc軸方向の1次元鎖が主に担っていることが判っています[11]。その電気伝導に大きな影響を与えるのは、辺共有したO-Ir-Oの結合角や結合長なので、非線形性や抵抗履歴は電流印加により局所構造に変化があると推測しました。その観測のために局所構造変化に敏感な電流印加下のラマン散乱を計画し、2022年6月から広大の長谷川らと行いました(余談:この広大訪問時に、鬼丸さんから"アシンメトリ量子"への参加を打診され、快諾しました)。実験は主に林田さんが行ました。幸いラマンスペクトル

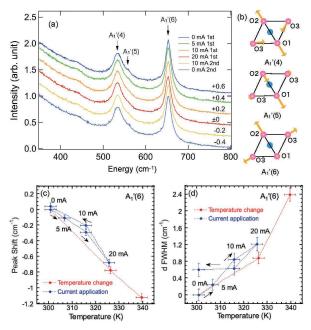


図3 ラマンスペクトルの電流依存性

測定は通常の温度変化とDC電流印加下で行われた。電流印加下の試料温度はストークスとアンチストークスの比から見積もられた。(a) ラマンスペクトルの電流依存性、(b) 観測されたピークに対応するIrO $_6$ の基準モードの模式図、(c) A1'(6)モードのピークシフトの温度変化と電流変化 (d) A1'(6)モードのピーク幅の温度変化と電流変化

[M. Hayashida, T. Hasegawa, K. Kadohiro, H. Hanate, S. Kawano, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 104704 (2024).]

が電流印加で変化する事が判りましたが、精度良く電流変化を調べるためにかなり苦労しました。実験条件などを工夫し、ようやく再現性があり信頼できるデータを取得したのは、4度目の実験で2022年の年末でした。

ラマンスペクトルの電流依存性を図3に示します [12]。図に示されるピークは3つのモード(A₁'(4), A₁'(5), A₁'(6)) によりアサインされます[5]。これらは 主にIrO₆の酸素が関係した基準モードです。特徴的 なのはA1'(6)の全対称モードが、電流印加により、自己発熱による変化に加えて高エネルギーにシフトしていることがわかりました。これは電流を印加する と、Ir-Oの結合が強くなることを意味しています。

電流誘起の抵抗緩和現象

その抵抗履歴は、どのくらいの時間スケールで緩 和するのかを調べるために、いろいろな条件で測定

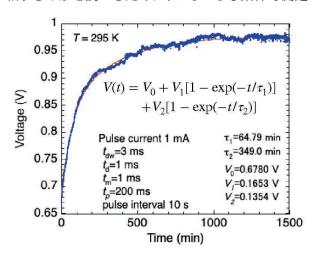


図4 電圧 (電気抵抗) の長時間緩和

30 mAのパルス電流印加後に、10s毎に1 mAのパルス電流を印加して測定された電圧の長時間緩和。2つの緩和曲線により緩和時間は64.79 minと349 min評価された。

[M. Hayashida, T. Hasegawa, K. Kadohiro, H. Hanate, S. Kawano, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 104704 (2024).]

を行いました。実験結果の解釈が難しかったのは、電流を印加すると、抵抗値が小さくなり、同じ測定をすぐに行うことが出来ず、再現性を確認することが困難でした。半年から1年程度のかなりの長期間のスパンで実験を繰り返し行い、定性的な振る舞いを確認しました。その典型的な緩和の実験結果を図4に示します[12]。この測定は30 mAのパルス電流を印加した後、1 mAのパルス電流を10 s間隔で印加し測定しています。このような非常に長い時間の緩和現象が電子系だけで生じていることは考えにくく、格子系に長時間緩和を生じるメカニズムがあると考えられます。その候補としては、Caや酸素のイオン伝導を検討しています。

電流誘起の異方的格子歪

電流印加時の格子の局所構造の異常がラマン散乱で見出されたので、これをマクロな格子定数の変化として観測できるのではと考え、KEK-PFのBL-4Cにて単結晶X線回折の測定を、門廣、花手、筒井らと行いました。この実験では、DC電流の印加下で行う必要があります。そのため、熱膨張とc軸方向の電流印加下の格子歪みを比較しました。その結果を図5に示します。なお、電流印加時の試料温度は、熱放射温度計により評価しました。その結果、電流印加した場合は、a/c比が熱膨張とは異なり大きくなること、つまりa軸が大きくなるがわかりました。この異方的な変化は単純な自己発熱では説明ができない振る舞いです[13]。

この異方的な格子歪を電場印加のピエゾ効果とし

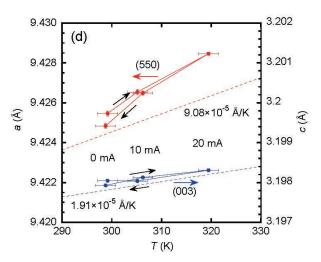


図5 格子定数の電流依存性

単結晶X線回折測定は温度変化およびDC電流印加下で行われた。 電流印加下の試料温度は熱放射温度計により見積もられた。(550) 反射からa、(003)反射からcが評価された、cは温度変化と電流印加でほぼ同じであるが、aは電流変化が温度変化よりも大きく変化している。

[K. Kadohiro, H. Hanate, M. Hayashida, T. Hasegawa, H. Nakao, Y. Okamoto, K. Miyazaki, S. Tsutsui, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 023601 (2025).]

て評価すると、90 nm/Vと巨大応答であることがわかります。しかし、圧電効果は、点群により許容な圧電定数が決まっています。Caslr₃O₁₂は圧電効果を示す点群に属していますが、c軸方向に電流(電場)を印加した場合には、c面内の方向の圧電効果は許容されません。したがって、この現象は圧電効果ではなく、異なるメカニズムによる現象と考えられます[13]。

同様な電流印加下での異方的格子歪は、Sr₂IrO₄ やCa₂RuO₄において観測されています[14,15]。どちらも圧電効果を示す点群には属していません。これらの物質には、スピン軌道相互作用が強い酸化物という共通の特徴があり、スピン軌道結合系酸化物の特徴ではないかと推測しています。この仮説を実証するために、同様な物質での研究を始めています。

(追記) この原稿を書いている際中に、KEK-PFにて、電流の正負の向きで格子歪がどうなるかの実験を行いました。その結果、c軸方向の電流の向きによらず、a軸が大きくなることがわかりました。これにより圧電効果ではないことが実証されました。

まとめ

本稿では最近の成果として発表した2本の論文のスピン軌道結合系物質Caslr3O12における電流誘起による抵抗履歴現象と異方的格子歪みについて紹介しました[12,13]。アシンメトリ量子としての研究目標である、結晶の対称性から予測される新しい交差相関応答の観測および応答の大きさの理論的予測という観点とは、やや異なる研究成果となりました。しかし、電流誘起により観測される異方的格子歪みにおいて、対称性からの考察は極めて明快であり、圧電効果とは異なるメカニズムと結論されました。

先日、2025年6月に甲府で開催されたトピカルミーティング「アシンメトリ量子物質の新展開:多極子のスケールシームレス化に向けて」では、アシンメトリの概念が拡張されている研究報告が多くありました。本研究も広い意味でのアシンメトリと言えそうな気がしてきました。

ある偉い先生に「アシンメトリ量子らしい研究成果を出すのはなかなか難しいです。」と言うと、「対称性だけから判るのは面白くないよ。面白ければ、なんでも良いのではないの。」という励ましのお言葉を頂きました。本研究も「アシンメトリ量子物質の開拓」の成果として何かに役に立つ時が来ることを期待したいと思います。

謝辞

本研究は松平研を卒業修了した、花手 洋樹、林田桃佳、門廣 圭祐の学生3名、そして、筒井 智嗣(JASRI)、長谷川巧(広大)、中尾裕則(A01: KEK-PF)、岡本佳比古(東大物性研)、宮崎康次(九大)との共同研究による成果です。そして、速水賢(B01:北大)、山地洋平(NIMS)、中村和磨(九工大)、網塚浩(A01:北大)との有益な議論に感謝します。本研究は文科省科研費(JP18H04327, JP22H01183, JP22H04953, JP23K22454, JP23H04867, JP23H04871)の支援を受けています。また、東大物性研共同利用による成果です。

^[1] M. Wakeshima, N. Taira, Y. Hinatsu, and Y. Ishii, Solid State Commun. 125, 311 (2003).

^[2] G. Cao, V. Durairaj, S. Chikara, S. Parkin, and P. Schlottmann, Phys. Rev. B 75, 134402 (2007).

^[3] K. Matsuhira, K. Nakamura, Y. Yasukuni, Y. Yoshimoto, D. Hirai, and Z. Hiroi, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 013703 (2018).

^[4] S. Tsutsui, H. Hanate, Y. Yoda, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 083701 (2021).

^[5] T. Hasegawa, W. Yoshida, K. Nakamura, N. Ogita, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 054602 (2020).

^[6] I. Franke, P. J. Baker, S. J. Blundell, T. Lancaster, W. Hayes, F. L. Pratt, and G. Cao, Phys. Rev. B 83, 094416 (2011).

^[7] H. Hanate, T. Hasegawa, S. Hayami, S. Tsutsui, S. Kawano, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 063702 (2021).

^[8] H. Hanate, S. Tsutsui, T. Yajima, H. Nakao, H. Sagayama, T. Hasegawa, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 063601 (2023).

^[9] S. Hayami, S. Tsutsui, H. Hanate, N. Nagasawa, Y. Yoda, K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 33702 (2023).

^[10] H. Hanate, K. Nakamura, and K. Matsuhira, J. Magn. Magn. Mater. 498, 166203 (2020).

^[11] M. Charlebois, J.-B. Morée, K. Nakamura, Y. Nomura, T. Tadano, Y. Yoshimoto, Y. Yamaji, T. Hasegawa, K. Matsuhira, and M. Imada, Phys. Rev. B **104**, 075153 (2021).

^[12] M. Hayashida, T. Hasegawa, K. Kadohiro, H. Hanate, S. Kawano, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. 93, 104704 (2024)

^[13] K. Kadohiro, H. Hanate, M. Hayashida, T. Hasegawa, H. Nakao, Y. Okamoto, K. Miyazaki, S. Tsutsui, and K. Matsuhira, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 023601 (2025)

^[14] R. Okazaki, K. Kobayashi, R. Kumai, H. Naka, Y. Murakami, F. Nakamura, H. Taniguchi, and I. Terasaki, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 044710 (2020).

^[15] G. Cao, J. Terzic, H. D. Zhao, H. Zheng, L. E. De Long, and P. S. Riseborough, Phys. Rev. Lett. 120, 017201 (2018).



Electric toroidal order and novel phase transition in quantum materials

Sheetal Devi

Postdoctoral Researcher, Graduate School of Engineering, Kyushu Institute of Technology

I earned my Ph.D. in Experimental Condensed Matter Physics from the Indian Institute of Technology Mandi, Himachal Pradesh, India in 2022, with my thesis titled Spin Ice and Spin Freezing in Disordered Pyrochlore Zirconates. Following this, I worked as a postdoctoral research fellow under the GNeuS Marie Skłodowska-Curie Action at Forschungszentrum Jülich, Germany, for two years. My research experience spans a diverse range of materials, including chemically disordered 3D pyrochlores, 2D triangular lattices, single-molecule magnets, and Kagome intermetallic. I have extensively employed techniques such as X-ray diffraction, Raman scattering, magnetization, AC susceptibility, thermodynamic measurements, muon spin relaxation (µSR), and powder neutron diffraction. These studies have allowed me to develop expertise in crystallography, magnetism, and thermodynamics, which I now seek to apply in the exploration of asymmetric quantum materials.

On 7th January 2025, I joined the Kyushu Institute of Technology for a two-year postdoctoral position under Prof. Kazuyuki Matsuhira as a part of the C02 project—"Development of Novel Asymmetric Quantum Materials." In our laboratory, the primary research focus lies in investigating novel phase transitions and current-induced cross-correlated physical phenomena in Ir-based oxides and other 5d transition metal compounds. A central theme of

our work is the study of electric toroidal ordering, an emerging area of condensed matter physics that remains largely unexplored and holds significant potential for future discoveries.

These asymmetric quantum materials hold great promise for applications in sensors, actuators, energy harvesting devices, and next-generation memory technologies. For example, the search for high-performance, lead-free piezoelectric materials is a major focus in material science, driven by both environmental concerns and evolving technological demands. However, finding suitable alternatives is challenging, as insulating behavior is often required to prevent the screening of electric polarization. Recent discoveries of piezoelectricity in twodimensional materials—such as transition metal dichalcogenides, black phosphorus, and hexagonal boron nitride—despite their non-piezoelectric bulk counterparts, have opened exciting new avenues for nanoelectronic applications. Materials like AgCrSe₂ and RbFe(MoO₄)₂, which combine polar structures with tunable conductivity or magnetic interactions, demonstrate how spin, charge and lattice degrees of freedom can be harnessed to yield useful multifunctional properties.

So far, we have studied the hexagonal perovskite Ba₄BiIr₃O₁₂ compound using low-temperature powder X-ray diffraction to identify the order parameter of a long-debated phase transition

at 215 K. Additionally, we have investigated the anisotropic lattice distortion in Ca₅Ir₃O₁₂ under applied current at BL-4C@KEK-PF. In relation to that, we have studied the temperature, frequency, and voltage dependence of the piezoelectric response using Laser Doppler Vibrometer (LDV) measurements on Ca₅Ir₃O₁₂. These measurements revealed a clear piezoelectric signal below 150 K, followed by the appearance of a Joule heating signal at higher temperatures. Detailed analysis of the collected data is currently in progress. In future, we will conduct LDV measurements on pyrochlore oxide Cd₂Re₂O₇ and other related materials. Additionally, XMCD (X-ray Magnetic Circular Dichroism) measurements at BL39XU@SPring-8 were conducted to investigate the possibility of magnetic octupolar ordering in Ca₅Ir₃O₁₂ at 7.8 K.

This opportunity to explore new materials and advanced experimental techniques has been deeply motivating and instrumental in shaping my long-term research goals. Beyond the lab, the calm and composed rhythm of life in Kitakyushu—so different from the fast-paced world—offers an ideal setting for living, learning and growing as both a scientist and a person. I look forward to seeing you at upcoming JPS meetings and workshops related to this project.



局在自由度の素励起から多極子の物理へ

小山 **慎之介**東京都立大学理学部 博士研究員

東京都立大学の小山慎之介と申します。2025年3 月に東北大学にて学位を取得し、同年4月より博士研究員として着任いたしました。今後は本領域の発展に貢献できるよう誠心誠意努めてまいります。どうぞよろしくお願いいたします。自己紹介に代えて、これまでの研究について簡単にご紹介させていただきます。

私はこれまで、局在電子系においてローカルな内 部自由度(多極子)が秩序化した際の、その素励起 に関する研究に取り組んでまいりました。例えば、局 在スピン自由度が秩序化すると、マグノンが素励起 として現れます。マグノンはスピン波理論に基づいて 導入されるボソン準粒子であり、SU(2)の代数が本質 的に関わっています。一方で、軌道自由度などのSU (2)対称性を持たない自由度が秩序化した場合には、 一般にスピン波理論を適用することができません。 こうした状況で有効なのが、フレーバー波理論です。 これはスピン波理論をSU(N)へ拡張した理論であり、 一般化スピン波理論とも呼ばれます。この理論を用 いることで、SU(2)に限らない多様な秩序状態に対 し、対応する素励起をボソン準粒子として統一的に 記述できます。具体例として、双二次相互作用を含 む量子スピン模型では、図(a)に示すようなスピンネ マティック状態と呼ばれるSU(3)代数に従う電気四極 子自由度が秩序化した状態が現れます[1]。このよう な非従来型の秩序に対しても、フレーバー波理論を 適用することでその素励起のエネルギーなどを得る ことができます(図(b))。

こうした素励起のバンド構造などを手がかりに、 量子・熱揺らぎの影響を含んだ様々な物理量を評価 することが可能になります。さらに、バンド構造がト ポロジカルに非自明である場合には、熱ホール効果 などのトポロジカル熱輸送現象も生じます。博士課 程では、主にこのようなトポロジカル熱輸送現象の 定式化に取り組んでおりました。

今後は、ローカルな多極子自由度にとどまらず、 拡張多極子を含むより広範な物理系にも関心を広 げ、多極子という概念を自由自在に操りながら研究 を進めていきたいと考えています。実験・理論を問 わず、さまざまな観点からの議論や共同研究の機会 をいただけると大変うれしく思います。学ぶべきこと は多くありますが、本領域の発展に貢献できるよう、 日々努力してまいります。

スピンネマティック秩序(電気四極子秩序)

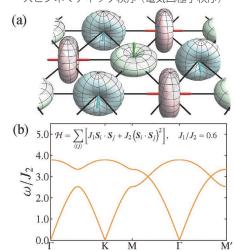


図 (a) 三角格子上におけるスピンネマティック秩序状態の模式図。 (b) フレーバー波理論によって得られたスピンネマティック状態における素励起の分散関係。スピンの長さは1とした。

[1] H. Tsunetsugu and M. Arikawa, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 083701 (2006).



磁性・対称性・機能性を結ぶ研究を目指して

川又 雅広

東京都立大学理学研究科 特別研究員

2025年4月よりC01班の特別研究員としてお世話になっております、川又雅広と申します。この度、C01班の博士研究員として東京都立大学に赴任いたしました。どうぞよろしくお願いいたします。

これまで私は、大学院生として在籍していた東北 大学にて、主に中性子散乱を用いた磁性材料の研 究に取り組んできました。特に、結晶や磁気の対称 性に基づいた磁気構造の解析手法を学び、その理 解を深めてまいりました。博士課程では、マルチ フェロイクス特性などの機能性を示すメリライト化 合物を対象に、磁気伝搬ベクトルや磁気異方性の 起源、磁気構造の決定因子について系統的に検討 し、機能性の発現に必要な磁気構造の理解を目指 した研究を進めました。近年では、磁気構造と機能 性との関係性が注目されており、マルチフェロイク スやスピントロニクス材料の設計にも深く関わって きています。このような中で、磁気構造の精密な決 定とその起源の解明は、様々な機能性が磁性・対 称性と結びつく物性物理の根幹をなす重要な課題 であると考えています。

また、在学中には幸運にも多くの学外実験に参加する機会に恵まれました。国内ではJ-PARCやJRR-3をはじめとする中性子施設において、海外ではオーストラリア、アメリカ、イギリス、フランスにて中性子散乱実験を行う機会をいただきました。特に海外の施設での実験では、異なる文化や研究背景を持つ研究者の方々と共に研究を行う中で、研究に対する打ち込みかたなど自身の視野が広がるのを実感しました。

東京都立大学に着任後も、早速、研究の幅・視野

を広げることができていると感じております。A01班の松村先生との共同研究により、Photon Factoryでの共鳴X線散乱実験を行い、またNanoterasuでの角度分解光電子分光実験に参加する機会をいただくなど、充実した研究環境のもとで活動させていただいております。現在は、これまでの量子ビーム実験の経験を活かしつつ、試料育成を学び、材料合成から機能評価までを一貫して行えるような研究手法を身に着けるべく精進しております。最近は、フラックス法や引き上げ法、高圧合成法といった合成手法の習得にも力を入れており、試料合成とミクロ測定との懸け橋となる研究者を目指してまいります。

現在注力しているテーマの一つは、Eu²+やGd³+などがダイヤモンド構造を持つ希土類金属間化合物の磁気構造についてです。ダイヤモンド構造は、スピネル化合物のAサイトなどでよく知られています。金属系のダイヤモンド構造において、RKKY相互作用の競合によって複雑な磁気構造が出現する可能性があります。私は、このような系における特異な輸送特性と磁気秩序の関係に着目し、中性子やX線などの量子ビームを駆使してミクロな視点からその関係に迫ろうとしています。

本領域において、多くの方々と交流し、スキル・知識・共同研究の幅を拡げていけることを大変楽しみにしております。今後ともご指導ご鞭撻のほど、何卒よろしくお願い申し上げます。



広島大学 磁性物理学研究室 & 自身の研究紹介

渡邉 寛大

広島大学大学院先進理工系科学研究科 博士課程後期3年

広島大学磁性物理学研究室の渡邉です。このたび、研究室紹介と自身の研究内容を紹介する機会をいただき、大変光栄です。

所属研究室について

磁性物理学研究室では、「 $f \cdot d \cdot p \cdot s$ 電子系におけるスピン、軌道、電荷、価数といった複合自由度を活かした新奇物性の開拓」を基本方針に研究を進めています(研究室紹介資料より)。

2025年度は、スタッフ4名(鬼丸先生、梅尾先生、 志村先生、比嘉先生)、学生13名、秘書様2名が在籍 しており、学生は3つのグループ(鬼丸G、梅尾G、 志村G)に分かれて研究を行っています。比嘉先生は、 各グループにまたがって実験補助などを担当されて おり、"遊撃手"的な存在です。

私の印象では、鬼丸グループは新物質探索に主軸を置いた"王道"の物性研究、梅尾グループは高圧環境下での精密測定に強みを持つスペシャリスト集団です。私の所属する志村グループは、量子現象の応用や新しい測定手法の開発など、ユニークな切り口で物性研究に取り組む"独立系"の雰囲気があり、自由度の高い研究が特徴です。

「斜め上の発想で目立とう」という志村先生の方針のもと、オリジナリティのある研究に取り組めるのが大きな魅力で、私が博士課程へ進学を決意した理由のひとつでもあります。先生の人柄については、X(旧Twitter)アカウント「simuron」がよく表していますので、ぜひ覗いてみてください。

研究室の魅力は「試料合成から極低温測定まで一貫して関われる環境」にあります。アーク炉、ブリッジマン炉、高周波炉などの合成装置に加え、³He冷

凍機や希釈冷凍機により0.1 K付近までの物性測定が可能です。オリジナルな測定系の開発や装置修理にも自分で携われるため、「装置を動かせる実験屋」になりたい人には理想的な環境です。

その一方で、設備が充実している分、維持管理も大変です。寒剤の補充や複数装置の保守に加え、人数が多いため、卒論・修論時期のマシンタイム調整もひと苦労。博士学生は主に長期休暇中などの"空いている時期"を狙って実験を進めますが、複数の実験が重なることも少なくありません。いわば"贅沢な忙しさ"です。

また、当研究室の特徴として「アクティブな雰囲気」も挙げられます。国内外の学会・研究会への参加や共同実験に加え、ゼミ合宿、物理学科のソフトボール大会、不定期のサッカー大会など、研究外のイベントも盛んです。こうした活動にはOBや他大学の先生も参加してくださり、学生と教員の距離の近さ、相談のしやすさにもつながっています。



↑~春のお花見会にて~ (simuron) →



自身の研究について

ここからは、私自身の研究について紹介いたします。 私は現在、³Heを使わずにサブケルビン温度域 (0.1~1 K)の極低温を実現するための、金属磁気冷 凍材料の開発に取り組んでいます。近年、世界的に ³Heの供給量が限られ価格も高騰しており、極低温 実験の実施自体が困難になりつつあります。そうし た中で、再注目されているのが磁気冷凍法です。

磁気冷凍とは、磁性体に外部磁場を加えた状態から断熱的に磁場を除去することで冷却する手法です。この冷却能力は、磁性体が持つエントロピー(磁気比熱)に依存しており、特に1 K以下まで冷却する為には、極低温まで磁気秩序を形成せず、かつ大きな磁気比熱を持つ物質が必要です。

そこで私は、YbやCeを含む重い電子系金属間化合物に注目して、磁気冷凍材料の探索を進めています[1,2]。とりわけ、磁気秩序相と非磁性相の境界=量子臨界点に位置する物質では、量子揺らぎにより磁気秩序が抑制され、極低温でも大きなエントロピーが残るため、冷媒として有望です。

今回紹介するのは、 $0.2 \text{ K以下で電子比熱係数} \gamma$ $\approx 7.5 \text{ J/K}^2\text{mol}$ という非常に大きな値を示すYbCu₄Ni に着目した研究です[3,4]。この物質を使い、図1に示すPPMSに取り付け可能な自作の磁気冷凍セルによる断熱消磁実験を行いました。初期温度1.8 K、磁場8 T から断熱状態で消磁したところ、磁気熱量効果により試料は0.16 K まで冷却されました(図2)。

現在、市販の断熱消磁冷凍機で使用されている極低温磁気冷凍材料(鉄ミョウバン、クロムミョウバンなど)は絶縁体の錯体であり、数十mKまで冷却可能ですが、潮解性や熱伝導性など、取り扱いに課題があります。その点、金属系材料は化学的に安定かつ熱伝導性に優れており、今後の冷凍材料として主流になることを期待しています。

最近では、電気抵抗率や比熱の極低温測定にも対応できるように、磁気冷凍材料の大型化やセルの改良も進めております。「実験に使ってみたい」「この材料に興味がある」といったご相談も大歓迎です。ご連絡お待ちしております!

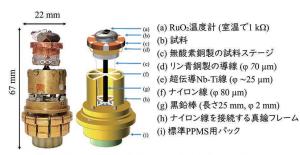


図1:自作セルの写真(左)および構造図(右)。[2]

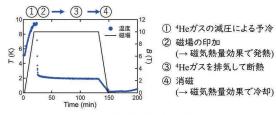


図2:磁気冷凍実験の手順 (左:試料温度/右:印加磁場)

[4] K. Osato et al., Phys. Rev. B 109, 024435 (2024).

^[1] Y. Shimura et al., J. Appl. Phys. 131, 013903 (2022).

^[2] K. Watanabe et al., Appl. Phys. Lett. 126, 092401 (2025)

^[3] J. G. Sereni et al., Phys. Rev. B 98, 094429 (2018).



トピカルミーティング 「量子ビームでプローブする新しい磁性状態 の可視化:手法開発と物性」

田端 千紘

日本原子力研究開発機構発機構

2024年12月27日から28日の2日間、KEKつくば キャンパス (つくば市) にて、A01主催トピカルミー ティング「量子ビームでプローブする新しい磁性状 態の可視化:手法開発と物性」を開催しました。世 間的には年末休暇に片足突っ込んでいると言っても よい日程にもかかわらず、全国各地から26名の参加 者に集まって頂きました。特に開催地であるKEKの 放射光施設PF (Photon Factory) は27日当日朝まで ビーム運転しており、ビームタイム終わってそのまま 研究会、という非常にハードスケジュールの参加者 もいました。もうちょっと身体に優しい日程にできな かったんかい、という反省もありますが、ビーム関係 者が全員集まれるのはビーム施設(SPring-8, PF, JRR-3, J-PARC等々) が運転していない時期しかな い、ということで、ピンポイントで年末開催となった 運びです。ただでさえ忙しい師走の終わりにお集ま り頂いた参加者の皆様、また開催準備にご協力頂い た方々に、この場を借りて感謝申し上げます。また、 28日は帰省ラッシュが始まりかけており、遠方からの 参加者には移動で負担をかけてしまったのは反省点 です。(飛行機のチケットを取るのが大変だったそう です。)

研究会では、4件の招待講演を含む15件の口頭講演が行われ、量子ビームを使った電子状態・電子秩序の観測研究の最新の成果が紹介されました。様々な多極子秩序の可視化への挑戦とその成果、可視化手法の開発状況について、活発な議論が行われました。近年注目度が増しているaltermagnetの話もあり、アシンメトリ量子の基本概念である多極子の秩序状態との関係について理解が進む良い機会になり

ました。また、秩序ドメインの可視化や分離、短距離 秩序など、メゾスコピック領域に関する議論も行わ れました。軟X線を透過配置で利用する実験では、 FIB加工による微小試料が必要となるため、計画研 究A02との連携が重要であることが確認されました。 一方で、FIB加工による試料表面のダメージにも言及 があり、表面敏感なプローブでは注意する必要があ りそうです。

1日目の夕方からは情報交換会がKEKキャンパス内で行われ、アットホームな雰囲気の中で参加者同士が活発に交流しました。研究の議論にとどまらず、大学業務に関する苦労話なども聞かれました。以前から言われていることですが、どこの大学でも研究以外の業務負担が肥大化しているようです。

プログラムは全体的に休憩時間を長めにとって議論できるように組みましたが、これが正解でした。参加人数が比較的少なかったこともあり、時間に追われることなく、じっくり議論できる雰囲気になりました。とはいえ、その雰囲気が会場にしっかり行き渡った結果、結局スケジュールが押してしまったのは反省点です。「何事もほどほどに」を実感しました。

本研究会を通じて、量子ビームを用いた電子秩序の可視化に関する理解、共通認識が一層進んだのではないかと思います。今後、参加者同士の連携の可能性が広がり、研究のさらなる発展につながることを期待しています。



トピカルミーティング 「精密計測×アシンメトリ量子物質: アシンメトリ量子物性の深化に向けて」@東海

芳賀 芳範

日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 研究主幹

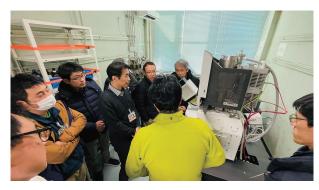
年度末も近づいた2025年2月9、10日に、「精密計測」をテーマとしてトピカルミーティングが開催されました。

微細加工技術を核とした精密計測は、アシンメトリ量子物質の研究手段として定着しつつあります。そんな中、A02班木俣さんが2024年10月に原子力機構に異動し、それに続いて最新のFIBが納入されたことで、東海が一躍微細加工の拠点となった感があります。トピカルミーティングは、このようなタイミングで開催され、最新の成果のみならず今後の研究発展に関する議論も活発に行われました。

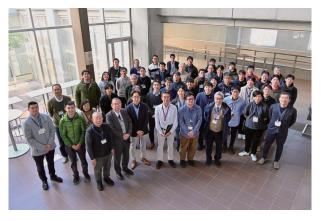
初日は東海駅前の「東海村産業・情報プラザ (アイヴィル)」において、口頭発表とそれに続く情報交換会、2日目は研究所に場所を移し、ポスターセッションと口頭発表、さらにラボツアーも盛り込んでの開催となりました。口頭発表では領域内外から15名の方に、最新の成果に関する講演をしていただきました。また、ポスターでは学生、若手も含めて23件の発表がありました。プログラムの中でも、微細加工を生かした研究成果が報告されていましたが、ちょつと前までは珍しかった技術も、その威力が認識されるにつれ、研究者人口が急速に増大し、その応用範囲も広がりつつあるように思われます。今後の展開が楽しみです。

今回、おそらくラボツアーを楽しみにされていた 方も多かったのではないかと思います。夕方の遅い 時間ではありましたが、約20名の方に申し込みいた だきました。一度に全員は入れないので、半分ず つ、それぞれ時間をずらして管理区域内の実験室と FIBを見学しましたが、面白いことにグループの個性 がはっきりと分かれました。若手の多いグループでは、熱い眼差しが説明者を取り囲み、一言一言が染み渡っていく印象。一方シニア中心のグループは、もちろん説明は耳に入っているのでしょうが、とにかく質問が止まらず、時間があっという間に過ぎていました。

東海といえば、中性子とウラン、というイメージが 強いと思いますが、今回、微細加工が新たなテクニックとして加わることにより、新たに東海を訪問された方もいらっしゃると思います。異なるバックグラウンドを持つ研究者の交流の良い機会となったのではないでしょうか。



ラボツアーの様子。FIBを見学するシニアグループ。



2日目、原子力機構先端基礎研究センター1階ロビーでの集合 写真。



トピカルミーティング 「アシンメトリ量子物質の新展開: 多極子のスケールシームレス化に向けて」

松田 達磨

東京都立大学理学研究科 教授

2025年6月12,13日に山梨県立図書館にて、表題 のようなアシンメトリ量子物質の展開に関するトピカ ルミーティングが開催されました。参加者は54名 (領域内25、領域外13、学生16名)で、17件の口頭 発表(うち3件は若手)、ポスター発表は22件ありまし た。本研究会は、領域の評価委員を務めていただい ている山梨大学名誉教授の鳥養映子先生のサポー ト・ご提案により、山梨県立図書館の多目的ホール 等を使用して行われました。甲府駅前の好立地に加 え、天気が良ければ甲府城跡の後ろに富士山も望め るという大変眺望の良い会場で、快適な環境の中実 施されました。研究会に先立って、前日の11日には、 C01班代表の大原先生による市民講演も行われ、会 場いっぱいの参加者がありました。タイトルは「山梨 とカイラリティ~右と左の不思議~」で、クイズを交 えながら、とても楽しい講演が行われました。一般向 けといいつつ、大原先生のカイラリティに関する造 詣の深さを反映する内容で、研究会参加者が聞いて いても、「なるほど」、「知らなかった」というようなカ イラリティに関する歴史や、山梨との関係性につい ての話題が盛り込まれており、あっという間の1時間 講演で、一般の方もかなり楽しめたのではないかと 思います。(本市民講演については本号別記事を参 照ください。)

さて、研究会は、「スケールシームレス」をキーワードに、実に多彩な物質系についての話題が展開されました。無機、有機、またそれらのハイブリッド系、あるいは外場の非対称性や化学反応、内部自由度の活用による様々なスケールでのアシンメトリ物性について講演がありました。特に、化学をバックグ

ラウンドとする研究の成果・展開・応用には圧倒されるものがあり、会議総括において北大の吉田先生が述べられたように、「分野融合の重要性」を実感するものでした。また一方で、様々なスケールでのアシンメトリ量子物性研究が展開される中で、阪大の井澤先生が指摘されたように、それらの現象の理解としては、単純にスケールシームレスとはゆかず、本質として関わる物理が同じで良いか慎重に吟味しながら議論をする必要があり、様々な物質系の展開と共に、領域研究の次なる景色と、課題が見えてきたような気がいたしました。

甲府という立地もあり、プログラムの終わった夕方 以降も、たくさんの酒石酸やポリフェノール(♥)を摂 取しながら、議論を深めた方もおられたようです。ま た、個人的にはポスターセッションや情報交換会で 学生やポスドクの皆さんと話しながら、大変元気を もらった気がいたします。本領域活動をきっかけに、 たくさんの若手が飛躍していただければと思いまし た。



ポスター発表会場の様子



会場の山梨県立図書館多目的ホールでの集合写真。天気が良ければ富士山が望めるとのこと。

2025年6月11~13日 「アシンメトリ量子物質の新展開:多極子のスケールシームレス化に向けて」 口頭発表プログラム

2025/6/1	.1(水)						
	15:00		受付開始				
	17:00 18:00		市民向け講演会				
			大原 繁男	名古屋工業大学	山梨とカイラリティ~右と左の不思議~		
2025/6/1	.2(木)						
座長							
	9:00	9:10	オープニング(
	9:10	9:40	松田 達磨	東京都立大学	カイラル構造を持つ物質の電子状態の研究および最近の物質探索について		
	9:40	10:10	石川 孟	東京理科大学	ジャイロイド構造を持つ物質における多極子物性の探索		
	10:10	10:40	休憩				
11:10 11:40 13:00	10:40	11:10	谷口 耕治	東京科学大学	キラル有機・無機ハイブリッド系における非反転対称性誘起物性		
	11:10	11:40	山田 鉄兵	東京大学	温度・濃度の勾配を利用した電気化学発電		
	11:40	13:00	昼食休憩				
	13:00	14:30	ポスター				
	14:30	14:45	休憩				
15 15	14:45	15:15	岡本 裕巳	分子科学研究所	キラル光学効果による顕微イメージング		
	15:15	15:45	澤田桂	理化学研究所	複異方性をもつメタマテリアルの理論		
	15:45	16:05	小林 康仁	大阪大学	新規ルチル型層状ホモロガス系列Na(PtO2)2n+1における白金による1次元磁性		
	16:05	16:35	休憩				
小林(夏)	16:35	17:05	渡邉 峻一郎	理研 CEMS	分子性半導体の電荷、スピン、フォノン		
	17:05	17:35	三澤 貴宏	東大物性研	有機化合物における等方的なスピン分裂を示す補償フェリ磁性体		
	17:35	17:55	小山 慎之介	東京都立大学	スピン非保存の局在スピン系におけるスピンネルンスト効果		
	18:30		情報交換会(小作甲府駅北口店)				
2025/6/1	2(全)						
吉田	9:00	9:30	金澤 直也	東大生研	キラル結晶における電子状態のアシンメトリとトポロジー		
	9:30	10:00	石井あゆみ	早稲田大学	一次元らせん物質が拓く光とスピンの新展開		
	10:00	10:30	休憩		A SAME CONTRACTOR		
大原	10:30	11:00	鬼丸孝博	広島大学	希土類の多極子自由度を使った空間スケールの拡張と機能開拓に向けて		
	11:00	11:30	松野 丈夫	大阪大学	酸化物界面におけるDM相互作用の実験的評価		
	11:30	13:00	昼食休憩				
鬼丸	13:00	13:30	打田 正輝	東京科学大学	面内異常ホール応答の開拓		
	13:30	14:00	井澤公一	大阪大学	磁気トロイダル系における非線形伝導テンソル		
	14:00	14:20	桐越 研光	岡山大学	DFT+DMFT法による交差相関応答の評価:磁気トロイダル金属の非線形電気伝		



トピカルミーティング「Workshop on theory of cross correlations, multipoles, and computational material design」 @ 御殿場

大同 暁人

京都大学大学院理学研究科 助教

2025年2月16-18日、静岡県は御殿場市「御殿場高原時之栖(ときのすみか)」にて、理論に特化した研究会が開催されました。これはアシンメトリ量子が主催する最初の国際ワークショップでした。学生11名を含む合計27名の参加者が集まり、B01班を中心とした招待講演者による口頭発表10件、一般参加者によるポスター発表17件が行われました。

今回の研究会は非常にユニークで、「理論研究者を 聴衆として想定し、普段の研究会では省きがちな数式 の詳細を積極的に含めてディープな議論をしよう」と いうコンセプトのもとで開催されました。テーマを交 差相関・多極子・第一原理計算などに絞ることで、専 門性を共有した参加者による緊密な議論が可能にな りました。その一方で、実験の先生方も参加しておら れましたし、私自身メイントピックからやや外れた内 容を発表して沢山質問をいただきました。高い専門 性と幅広い物理を楽しむ懐の深さを両立した素晴ら しい研究会だったと思います。

口頭発表では第一原理計算の手法開発や、それを 用いた輸送理論、スピン秩序/スピン液体の同定 などが議論されました。多極子の分類・制御・定義、

図1 21:57の会場。遅くまでお疲れ様でした。

交替磁性、多体問題の手法開発と重い電子系物質への適用などの話題もありました。個人的にも沢山収穫がありましたが、特に軌道自由度のtriple-q秩序に関する服部先生の講演が興味深かったです。私の講演が超伝導でのtriple-q秩序だったので、思わぬところで共通点があり勉強になりました。ポスターの話題もバラエティ豊かでここでは紹介できませんが、プログラムに定められた時間以外にも活発に議論がなされていたのが印象的でした。

研究会の成功に一役買ったのが「全ての参加者が同じホテルに泊まり、かつ研究会の会場はそのホテルの一階」という、議論するのに最高の環境をオーガナイザーの先生・スタッフの方々が整えてくださったことだと思います。会場は夜10時まで開放され、一部の参加者は時間ギリギリまで活発な議論を交わしていました(図1)。口頭発表の時間が40分、コーヒーブレイクも40分と、時間的に余裕のあるスケジュールも成功の一因だと思います。大変楽しく実りのある研究会だったので、このような形式でまた開催されるといいなと思います。大槻先生をはじめとしたオーガナイザーの皆様、お忙しい中どうもありがとうございました。



図2 2日目集合写真。富十山を背景に。



受賞ニュース



野村 悠祐 東北大学 金属材料研究所 教授

東北大学金属材料研究所の野村悠祐教授(計画研究B01)が、令和7年度科学技術分野の文部科学大臣表彰において若手科学者賞を受賞されました。受賞業績は「機械学習手法の新規開発と応用による量子多体物性の研究」です。野村悠祐氏は、多体性と量子性が絡み合う量子多体系の謎を解き明かすため、機械学習の技術を用いた高精度な変分モンテカルロ法を開発しました。これにより量子スピン液体の存在や分数化励起を明らかにし、さらに有限温度での量子状態を柔軟に記述する手法も提案しました。



松村 武 広島大学大学院 先進理工系科学研究科 教授



大原 繁男 名古屋工業大学大学院 工学専攻 教授

広島大学先進理工系科学研究科の松村武教授(計画研究A01)と、名古屋工業大学工学研究科の大原繁男教授(計画研究C01)が日本物理学会第30回論文賞を受賞されました。受賞論文は"Chiral Soliton Lattice Formation in Monoaxial Helimagnet Yb(Ni_{1-x}Cu_x)₃Al₉", J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 124702 (2017)です。磁化測定からカイラルソリトン格子の存在が示唆されていたYb(Ni_{1-x}Cu_x)₃Al₉において、結晶の左右掌性の違いでらせん磁気構造の回転の向きが変わることや、磁場中での磁気反射の高調波成分の増大を共鳴X線散乱で観測し、f電子系におけるカイラルソリトン格子の存在を初めて実証しました。



上田 健太郎 東京大学大学院 工学系研究科 講師



鬼頭 俊介 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 助教



大同 暁人 京都大学大学院 理学研究科 助教

第19回日本物理学会若手奨励賞を、東京大学工学系研究科の上田健太郎 講師(公募研究D01)、東京大学新領域創成科学研究科の鬼頭俊介助教(公募研究A01)、京都大学理学研究科の大同暁人助教(公募研究B01)が受賞されました。

上田氏の受賞業績は、「希土類化合物におけるトポロジカル交差相関物性の研究」(Nat. Commun. **14**,6339 (2023), Phys. Rev. B **105**, L161102 (2022), Nat. Commun. **9**,3032 (2018))です。磁性ホイスラー化合物HoAuSnやパイロクロア型酸化物 $Pr_2Ir_2O_7$, Nd $_2Ir_2O_7$ において、磁場誘起ワイル半金属転移や自発的ホール効果を観測し、近藤結合や4fモーメントが誘起するバンド再構築による巨大磁気抵抗やトポロジカル転移の機構を明らかにしました。

鬼頭氏の受賞業績は、「強相関電子系物質における価電子軌道の可視化」(Phys. Rev. Res. $\mathbf{2}$, 033503 (2020), Adv. Sci., $\mathbf{10}$, 2302839 (2023), Phys. Rev. B $\mathbf{109}$, L100101 (2024))です。放射光X線回折と電子密度解析により、RTiO $_3$ の軌道状態、SrFeO $_3$ の配位子ホール、VO $_2$ のV-V二量体化を実空間で可視化し、軌道自由度や異常原子価、相転移機構の理解に貢献しました。

大同氏の受賞業績は、「有限重心運動量超伝導体における非相反応答の理論研究」(Phys. Rev. Lett. **128**, 037001 (2022), Phys. Rev. B **106**, 205206 (2022), Phys. Rev. Res. **6**, L022009 (2024))です。超伝導ダイオード効果の内因的機構を理論的に解明し、臨界電流の非相反性や符号反転の普遍性を示しました。さらに、有限運動量クーパー対による非相反電荷輸送の増強も明らかにし、新たな超伝導現象の探究に貢献しました。

AIは量子物質の夢を見るか?

石渡 晋太郎

大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

2017年5月、将棋の名人位にあった佐藤天彦氏が AIソフトのPONANZAに敗北した。当時、既にAIが トッププロ棋士を凌駕しつつあるとみられていたが、 その現実を目の当たりにして失望感を抱いたファンは少なくなかったと想像される。筆者もその1人であったが、将棋と比べて圧倒的に局面数の多い囲碁において、世界最強のプロ棋士と謳われたイ・セドル氏がAIソフトAlphaGoに完敗したのがその前年であったことを考えると、将棋のプロ棋士は健闘したという見方もできそうだ。あるいは、将棋AIの開発が囲碁と比べて遅れた背景には、市場規模や研究開発費の違いもあったのだろう。

この点に関して、PONANZAを開発した山本一成氏 は、局面の善し悪しを適切に数値化する評価関数の 構築の難しさを主な理由として挙げている[1]。囲碁 の場合、駒は2種類のみでそれらが盤面上を動き回 ることもないために、棋譜を画像データとして深層学 習(畳み込みニューラルネットワーク)に使える形に 容易に落とし込むことができる。それに対して将棋 は、8種類の駒それぞれに固有の動きがあり、さらに 持ち駒ルールも相俟って盤面がダイナミックに変化す るため、評価関数の構築や学習のためのデータ設計 がはるかに複雑になる。そのため、将棋AIの発展に は、既存の画像認識の枠組みにとどまらない、より創 造的な工夫が求められた。PONANZAがその壁を突 破できた背景には、単にアルゴリズムの改良だけで なく、人間の棋譜に依存しない自己対局による強化 学習的アプローチの導入があった。これは、AIが人 間の知識を超えて自律的に学ぶ能力を獲得し始め た、歴史的瞬間であったと言えるかもしれない。

こうした話をしていると、AIは人間の知性や直感を 置き換える存在なのか、という問いを立てたくなる。 実験的研究に携わる一研究者としての意見になるが、 AIの本質的な価値は、人間を置き換える云々という話 ではなく、人間にとって認識が困難な情報を可視化す る新しい眼鏡として機能する点にある、と思われる。そ の眼鏡を通して何を見るか、そしてどこへ進むかを最 終的に決めるのはあくまでも人間、というわけだ。藤 井聡太氏をはじめとするトップ棋士たちが、AIを日常 的に活用しながら新たな手を研究していること自体、 AIが眼鏡として機能していることの好例だと言える。AI によって見出された最新の流行の手の中には、かつて 人間が悪手として葬り去った手も含まれており、まさに AIという眼鏡によって常識を超えた世界が広がりつつ あると言える。また、AIの眼鏡としての機能は、将棋の 世界に新たな観戦文化をもたらした。テレビ中継で は、AIによる勝率表示が導入されたことで、局面の優 劣が数値でリアルタイムに示されるようになった。これ は、形勢判断の難しさから将棋を敬遠しがちだった視 聴者にも直感的な理解を促すものであり、新たなファ ン層の獲得につながった可能性が高い。いつの頃か らか、終盤に藤井氏が放つ妙手によって勝率が急上 昇する様子は「藤井曲線」と呼ばれるようになるなど、 勝率表示は観戦者を楽しませる視覚的なしかけとして の役割も果たしているようだ。

では量子物質開発においてもAIは眼鏡として機能 するのだろうか。話はそれほど単純ではなさそうであ る。というのも、将棋AIで用いられる評価関数と比較 しても、量子物質開発における評価関数の構築は桁 違いに難しいからだ。その理由の一つに、量子物質

の合成には本質的に非線形性が存在し、同じ合成レ シピでも得られる試料が再現しないことがある、とい う点が挙げられる。原料の形状や純度、合成温度・ 圧力、実験室の温度や湿度といった様々な条件のわ ずかな違いによって、得られる物質の化学組成や構 造が変わりうる。さらに量子物質の構造機能相関に おいては、電子相関の帰結としての非線形性や創発 性が存在する。このような高次の非線形系において は、その振る舞いを単純な因果関係で説明すること は困難であり、機械学習を適用して意味のあるモデ ルを提案するには、大量かつ多様な学習データが必 要になる。しかし、現状ではそれが圧倒的に不足して いる。ここがAIを活用した量子物質開発のボトルネッ クになっているように思われる。こうした状況下では、 少ないデータでも本質的な構造機能相関を捉えられ るように適切な記述子を導入することが、有効なアプ ローチになると考えられる。対称性やトポロジーと いった物質の普遍的な構造情報はその候補になる。 特に近年注目されている多極子という概念は、結晶 構造やスピン構造の群論的記述では捉えきれない情 報も含めて、広い範囲の構造機能相関を体系的に分 類することができるため、有効な記述子として活用さ れることが期待される[2]。

AIの価値が科学においても認知されつつあることを象徴する出来事として、昨年のノーベル物理学賞の授与がある。ジェフリー・ヒントン氏らによる深層学習の理論と応用が受賞の対象となったことに対し、「これは物理学なのか?」という疑問も一部では投げかけられたようである。過去を振り返ると、第1回ノーベル物理学賞はX線の発見に対して授与されており、それは物質の内部構造を可視化するという点で、まさに画期的なツールであったことに気付く。その後もX線回折による結晶構造の可視化に貢献したラウエやブラッグ親子に対してもノーベル賞が与えられてき

た。さらに時代を遡れば、天文学を切り拓いたガリレオが、望遠鏡という新しい観測技術を用いたことにより、従来の世界観を覆す発見を成し遂げたことを思い出す。このように歴史を鑑みれば、深層学習によって高次元データの構造や相関を可視化することができるようになった今、AIが21世紀のX線として物理学の地平を広げているというノーベル財団の評価は、時代の必然と言っても過言ではないように思われる。

このようにAIの認知が広がる一方で、日本的な 「秘すれば花」の感性とは必ずしも調和しない場面も しばしば見受けられる。とりわけ物質開発の現場で は、理屈では語れないが経験的にうまくいく、という 匠の勘が今なお重視されている。面白い新物質を見 つけるコツはありますか?といった質問を学生から受 けることがあり、大抵は「勝ちに不思議の勝ちあり、 負けに不思議の負けなし」といった格言めいた言葉 でお茶を濁してきた。要するに数多くの失敗を経験し て匠の勘を身につけよ、ということなのだが、残念な がらそれを実行するだけの時間的余裕を今の世の中 に見出すことは難しい。これからの量子物質開発に おいては、秘すれば花的な感性をうちに秘めつつも、 AIによる情報の可視化技術を相補的なツールとして 使いこなせるかどうかが問われているのではないだ ろうか。ツールの使い手が人間である限り、我々の美 意識や感性はどこかに反映されるはずである。

AIは量子物質の夢を見るか?――2025年現在の筆者の答えは明確である。AIが量子物質の夢を見るのではない。夢を見るのは人間であり、AIはその夢を鮮やかに捉えるための眼鏡に過ぎない。その眼鏡をかけて、我々は新たな量子物質の夢を見続けるのである。

^[1] 人工知能はどのようにして「名人」を超えたのか? 山本一成 ダイヤモンド社 2017年

^[2] T. Nomoto, S. Minami, Y. Yanagi, M.-T. Suzuki, T. Koretsune, and R. Arita, Phys. Rev. B 109, 094435 (2024).



山梨とカイラリティ ~右と左の不思議~

大原 繁男 名古屋工業大学 教授

1. はじめに

甲府の山梨県立図書館を会場に市民講座でお話する機会をいただいた。講演題目は躊躇なく「山梨とカイラリティ ~右と左の不思議~」とした。山梨といえば、水晶、ワイン、富士山、武田信玄などが連想される。水晶とワインはカイラリティの科学的発見において重要な役割を果たしているため、山梨はカイラリティを語るのによいところなのである。

ここでは講演内容を振り返るとともに、聴講者へのアンケート調査結果も一部報告する。1時間という短い講演時間であったので、カイラリティとはなにか(定義)と身近な例、水晶と酒石酸塩(ワインの中でみつかる結晶)からどのように科学者が鏡像異性体の存在に気づいたかに絞って話をした[1-4]。

アミノ酸、グルタミン酸とサリドマイド、はやぶさ2による小惑星での左右アミノ酸の発見、野依良治博士の不斉合成によるノーベル賞、武田信玄と徳川家宣(甲府城主から六代将軍)の家紋から学ぶ対称性の話も準備したが、想定通りに時間不足で話せなかった。そのため、対称性(非対称性)とカイラリティの関係が説明不足となったことは反省である。

講演の冒頭で「講演を聞き終わると右も左もわからなくなります!」と話しかけて、いったいどういうことなのだろう、と思ってもらうしかけにした。

2. カイラリティとは

最初にカイラリティとは何か、ケルビンによる定義 (1884年) を説明した[5]。あるモノを平面鏡に映し、鏡に映ったモノ (鏡像) を取り出したとする。取り出したモノをどう回転させても元に戻らない場合、その

モノはカイラルであり、カイラリティを持つ、という。 元に戻る場合はアカイラル(カイラルでないの意) と呼ぶ。

定義はわかりましたか? と手を挙げてもらって確認した後、身近なカイラルを例示した。

ひとつは、靴、手袋、足袋、グローブ、ハサミ、カッターナイフ、おたまなど、人の身体の左右性に起因する物品をあげることができる。このときに、軍手やビジネスソックスなど、左右性を意図的になくした製品もあることも指摘した。これは、対称性と機能が結びついている例と言え、左右どちらかに特化して使いやすい、左右どちらにでも使えて便利、という機能の発現に気づくことができる。

もうひとつは、回りながら進むモノである。代表は ネジで、右ネジは右に回すと進む。大事な概念とし て、締めるときも緩めるときも右ネジは進む向きに 対して右に回ることを指摘した。他に、ワインオープ ナー、シャトルコック、螺旋階段、ぶどうなどの植物 の蔓、巻き貝、しめ縄、水素ボンベの減圧器を例示 した。また、カイラルなモノのどちらを右(あるいは 左)と呼ぶかは定義の問題であり、しばしば混乱が 起きていることも紹介した。

台風が北半球と南半球で逆巻きになることもカイラルとして紹介した。その上で、実は目線が変わっており、北から見る(表から見る)か、南から見る(裏から見る)かで、巻き方が逆転しているように認識していることを指摘した。蚊取り線香を台風に見立てて演示してみたが、わかってもらえていると嬉しい。この話から、カイラリティからは脱線するが、地磁気の生成と生物の走磁性の話[6]も混じえた。

3. 山梨とカイラリティ

(1) 水晶の旋光性

山梨といえば水晶で有名である。乙女鉱山などから、透明で良質な水晶を産出したことが知られている。縄文時代の水晶の鏃も発見されている[7]。

講演では、歴史に沿って水晶の外観のカイラリティと旋光性の発見から紹介した。 α 水晶(石英の低温相、以下水晶)が2種類の外観を持つことに気づいたのは、結晶学の父と呼ばれるRené Just Haüy(ルネ=ジュスト・アユイ)と言われている。図1は回覧した左水晶(空間群 $P3_121$ 、#152)と右水晶 ($P3_221$ 、#154)および方解石の観察キットである。

アユイは結晶の外観を丁寧に調べ、検討を加えたフランス人学者である。1780年頃、アユイはうっかり



図1 回覧用に作製した左右水晶および方解石の観察キット

(あるいはわざと)落とした柱状の方解石が同じ形の小さなかけらに砕けることに気がついた。別の産地の結晶も同様に割れたことから、アユイは、方解石は菱面体で形成されている、と考えた。他に柘榴石や岩塩、黄鉄鉱、石膏などでも実験を行い、結晶は菱面体、立方体、正四面体といった構成単位の三次元周期的集合体として形成されると主張し、それをintegrant molecule (積上分子)と名づけた。なお、レントゲンによる X線の発見 (1895年)やラウエによる X線回折実験 (1912年)よりはるか以前のことである。

『結晶学概論』(Traité de cristallographie)の図を見ると、いろいろな鉱物の外観が積上分子によって形成できるようすが示されている。黄鉄鉱においてみられる五角形(正五角形ではない)からなる12面体も描かれている。黄鉄鉱といえばサイコロ状の鉱物を思い浮かべるが、12面体にも成長する。図2は立方体と12面体の黄鉄鉱の写真である(筆者所蔵)。



図2 サイコロ状と五角12面体の黄鉄鉱



図3 方解石による複屈折

この両者が立方体から形成できることに気づくには 割ってみる必要があるだろう。

積上分子の発想のきっかけとなった方解石であるが、大きな結晶はアイスランドで取れたためlceland spar (氷州石) と呼ばれていた。方解石を通して一つの点を見ると、図3に写真を示すように、二つの点に割れて見える。方解石を回すと、一つは動かず、もう一つはその周りを回転する。動かない方を正常光線、動く方を異常光線と呼ぶ。これは方解石中で進む向きによって光速が異なるため生じ、複屈折と呼ばれ、互いに垂直な偏光になっている。

Dominique François Jean Arago (ドミニク・フランソワ・ジャン・アラゴ) はガラスなどの反射を利用して作り出した偏光を水晶板に通し、それを方解石越しに観察した[8]。すると、正常光線と異常光線が互いに補色の関係になることがわかった。これは水晶による偏光面の回転とその波長依存性の結果であるが、アラゴの報告は観察事実にとどまった。

Jean-Baptiste Biot (ジャン=バティスト・ビオ) は

偏光を方解石に通して、正常光線しか生じない状況を作り、方解石の前に水晶板を入れると着色した異常光線が生じることを明らかにした[9]。光は水晶の(今で言う) c軸に平行に入射している。色は水晶板の厚さに依存し、分厚くしていくと紫から赤へと変わる。この実験からビオは、水晶が旋光性を持つこと、その角度が色によって異なることを報告した。また、ビオは厚さ4.1155mmの水晶板と厚さ4.005mmの水晶板を重ねた実験を行ってもいる。このとき、偏光面の回転角は倍になるはずが、旋光性が消えてしまった。なにか性質が逆のものが混じっているとビオは考えたが、2つの水晶に違いを見出すことはできなかった。

水晶の2種類の外観と旋光性の関係に気づいたのはフランス人ではなく、イギリス人のJohn Frederick William Herschel (ジョン・フレデリック・ウィリアム・ハーシェル) である[10]。ハーシェルもビオたちと同様に切り出した水晶板で実験していたが、元の水晶の「頂点」を保存していたために、結晶の外観と旋光の向きに1対1の関係があることに気づいた。

ハーシェルの論文を読むと丁寧に再現性を確認していることがわかる。不運にもハーシェルの左右結晶および旋光の向きの定義は現在と逆であり、水晶の左右の表現の混乱の元となっている。しかしハーシェルは全く悪くない。世界で初めて結晶の左右性と旋光性の対応に気づいたのであり、何らかの定義をして論ずるのは当然である。たまたま現在の定義とハーシェルの定義が逆だっただけである。

講演では二枚の偏光板を直交させて光を遮断したうえでセロハンを45度に挟むと、光が通るようにな

る演示を見せた。これはセロハンの複屈折によるものであり旋光性ではない。しかし、偏光を感じてもらうことができ、どのような実験で水晶の旋光性が調べられたのか想像しやすくなると考えて演示した。

これにより水晶は2種類あることは明確になったが、いったい何が違うのかは想像することができていなかった。この点に大きな示唆を与えることになるのが酒石酸塩に関してのLouis Pasteur (ルイ・パスツール) の研究である。

(2)酒石酸塩のカイラリティ

ワインの中に酒石酸塩の結晶が生えていることがある。酒石酸(Tartaric acid、 $C_4H_6O_6$)は葡萄などに含まれる酸であるが、お酒の中で発見されたために、酒石酸と命名された。

ワインから採取された酒石酸塩の水溶液は偏光を 右に回すのに対し、人工的に合成した酒石酸塩は旋 光性を示さないことが知られており「酒石酸の謎」と されていた。これを解いたのがパスツールである。

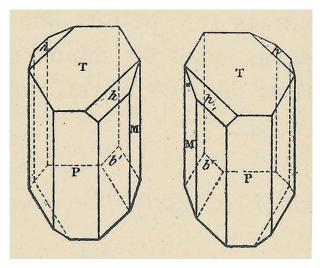


図4 パスツールによる酒石酸塩のスケッチ

パスツールは合成した酒石酸ナトリウムアンモニウム(複塩)の結晶が図4に示すように、水晶と同様に、2種類の外観を持つことに気がついた。丹念に結晶を外観から区分して水溶液にすると、一つはワインから採取された酒石酸塩と同じく偏光面を右に回すのに対して、もう一方は左に回すことがわかった[11]。若きパスツールは興奮して廊下に走りでたとされている。「いま大発見をしたところだ。パラ酒石酸のナトリウムアンモニウム複塩が2つの塩に分割できて、なんとそれらは左右鏡像性が反対で(dissymetrie inverse) 偏光面に対する性質も反対なんだよ。右の方の塩は天然の右酒石酸のそれと全く同じなんだ。あんまり嬉しくてふるえがきて、もう一度、旋光計を覗こうと思っても駄目なんだ。」([1]から引用)

ケルビンがカイラルとカイラリティの造語と定義を したのが1884年であるから、パスツールの1848年 のこの発見当時はカイラリティという言葉がない。パ スツールはdissymmetricと表現している。

このことは直ちにビオの知るところとなり、パスツールはビオによる厳しい検証を受ける羽目になった。ビオはパスツールに必要な器具や原材料を示させ、それらをビオ自身で用意した。ビオが監視する中、パスツールは結晶を合成し、外観による分離を行った。こちらの結晶が自然にはない左旋光性を示すと予言させた上でビオ自らが水溶液を作成して、旋光性を測定した。一目で左旋光性を確認したビオは、立ち上がり、振り向いてパスツールにこう言ったと伝えられている。「愛しい我が子よ、私の生涯において、私はどんなに科学を愛したことだろう。それだ

けに、これは私の胸を高鳴らせる。」(Mon cher enfant、j' ai tant aimé les science dans ma vie que cela me fait battre le cœur.)([1]から引用)

パスツールは幸運であったことが後にわかっている。パスツールは酒石酸ナトリウムアンモニウムを左結晶と右結晶に外観から分離したわけだが、実はこれ以外の酒石酸塩は左右の分子が混じった結晶(ラセミ結晶)となる。酒石酸ナトリウムアンモニウムだけが左右の結晶の混合物(ラセミ混合物)となる。また、28℃以上で結晶化すると1水和物となりパスツールの利用した結晶の斜傾面(図4)がでない。斜傾面を持つ4水和物が成長するには成長時の温度が28℃以下でなくてはならない。早春のパリという環境がこの条件を満たしていたのである。

ここでラセミという言葉を使ったがラテン語で葡萄の房という意味であり、人工合成した酒石酸のことを葡萄酸(Racemic acid)と名づけたことによる。パスツールが「パラ酒石酸のナトリウムアンモニウム複塩」と感激して叫んでいるのは(こんなに長く叫ばない気がするが)人工酒石酸は旋光性示さないため「パラ酒石酸」と呼ばれていたからである。パスツールにより、人工酒石酸は左右結晶が同じだけ混じっていることがわかり、転じて「左右が同じだけ混じっていること」をラセミと呼ぶようになった。

酒石酸塩は分子性のイオン結晶であるから、自然に得られた酒石酸塩の水溶液には右酒石酸分子が含まれている。そのため、水溶液も右旋光性を示す。 人工の酒石酸塩は鏡像異性体を同数含むため、その効果が打ち消しあい旋光性を示さない。

溶かした水晶は旋光性を示さないことはビオによ

り発見されていた。パスツールはのちにこのことを 次のように表現している。「水晶の構造と天然有機物 のそれとをここで説明させて戴きたいと存じます。立 方体や、鏡像と重なり合うものならなんでもよいの ですが、これからできている螺旋階段を想像してみ て下さい。この階段を壊せば左右鏡像性はなくなる でしょう。この階段の左右鏡像性はその個々の段の 配置の結果に過ぎないのです。こんなのが水晶で す。水晶の結晶は階段全体にあたります。(後略)」 ([1]から引用)

水晶と酒石酸塩から得られた情報は、全く同じ化学 組成であっても何か構造が異なり、逆の旋光性を持ち うる、という知見である。Joseph Achille Le Bel (ジョ ゼフ・アシル・ル・ベル) とJ. H. Van't Hoff (ファン ト・ホッフ) が炭素の正四面体配位を理論的に提唱 したのが1874年のことである[12、13]。鏡像異性体 や構造異性体が想像できるようになり、これにより立 体化学 (Stereochemistry) の研究が始まった。

興味深いことにLewis Carroll (ルイス・キャロル) が "Through the Looking-Glass、and What Alice Found There" (鏡の国のアリス) を発表したのが 1871年である。これはパスツールによる分子の左右性の発見と炭素の正四面体配位提唱の間にあたる。

ルイス・キャロルの本名はCharles Lutwidge Dodgson (チャールズ・ラトウィッジ・ドジソン) であり、オックスフォード大学クライスト・チャーチの数学講師である。幾何学の専門家であるから、鏡像が原像と一致しない例があると知っていたと思われる。ルイスはアリスに "Perhaps Looking-glass milk isn't good to drink." (鏡の国のミルクはおいしくないか

もしれないわ)と言わせるが、地球上のほとんどの 生命体が左アミノ酸と右糖類を利用していることから 実際に鏡像のミルクは美味しくないと思われる。ル イスは写真家でもあったから「ものが裏返る」という ことに強く想像がはたらいたかもしれない。このあた りの事情を知りたいと思い、ルイスの伝記などをいく つか調べたが、ルイスの教師としての逸話はあまり 芳しくない。なお、写真においてネガ(negative)と ポジ(positive)という言葉を使い始めたのはハー シェルなのだが、ここまでくると話が出来過ぎとしか いいようがない。

講演ではロッシェル塩も紹介した。圧電素子として 有名なロッシェル塩は酒石酸カリウムナトリウムである。第二次大戦中「ブドーは科学兵器」というポスターがつくられ、甲府や勝沼のワイナリーは軍の指示のもと酒石酸をつくることを求められた。甲府のワイナリーのサドヤが天皇へ献上し、サドヤに返還された、ロッシェル塩の写真をHPで見ることができる[14]。実際には、ロッシェル塩の合成は戦争での利用には間に合わず、甲府空襲によりサドヤは焼失した。現在、サドヤは再興されてワインを作っている。会場の山梨県立図書館のすぐ近くにサドヤはある(図5)。

人工水晶も山梨と縁がある。日本で最初に人工水 晶を作製したのは山梨大学である。直接には見えな いが水晶振動子として身近にたくさん使われている。 ロッシェル塩の圧電効果や水晶の振動子は非対称性 による機能発現の例であり、電気一機械変換機能を 生み出している。

さて、1858年にパスツールは新たな発見をする。



図5 甲府市のサドヤワイナリーの入口(著者撮影)

青力ビに酒石酸塩を食べさせると、右のみを食べて 左を残すことがわかったのである[15]。自然界には 右酒石酸しかなく、青力ビが右酒石酸しか食べられ ないことを知ったパスツールは「生命は宇宙の非対 称性の結果だ」(1884年)と考えるようになる。

後にパスツールは微生物の存在に気づき、スワンの首フラスコを使って、菌の侵入を防げばスープは腐らないことを示した。生命の自然発生説の否定である。また、蚕、鶏、羊などの産業動物の病気の理由を突き止め、防ぐ方法を編み出した。その一つが弱毒性の生ワクチンの開発であり、1881年に動物実験を行った翌年にはフランスの10万頭もの家畜がワクチンを接種されている。パスツールは儲けようとせず、原価でワクチンを広めたようである。パスツールは狂犬病のワクチンの開発でもよく知られている。パスツールによって狂犬病から最初に救われた青年はパスツールによって狂犬病から最初に救われた青年はパスツールの墓守として過ごし、ナチスドイツが墓を暴こうとした際に命をかけて防いだという伝説となっている。

ワインや酢がうまく発酵せず腐ってしまうことを防ぐための低温殺菌もパスツールによって開発された。お店で牛乳を買うときにパスチャライズとあれば、パスツールの方法によって殺菌した(低温殺菌)という意味である[16]。

(3) 富士山と非対称性

講演では富士山の非対称性についてもお話しした。 富士山はコニーデ型の美しい火山であり、逆さ富士 は鏡像対称の典型とも言える。しかし、火口を一周 するお鉢巡りには非対称性がある。実は多くの人が お鉢巡りを時計回り(上から見て)に行うのである。

お鉢巡りでの難所は馬の背と呼ばれる急勾配である。急勾配は人にとって降りるよりも登る方が安全なため、多くの人は馬の背をよじ登り、緩やかに降りながら火口一周のお鉢巡りを楽しむのである。勾配の非対称性が人の動きを制御する機能を出している、というと言い過ぎだろうか。講演ではこの話に続いてpn接合によるダイオード効果を非対称性が生み出す機能の例として紹介した。

最後に山梨県立図書館に所蔵されている左と右や水晶、パスツールに関する本、アリスの物語や図鑑を紹介した。アシンメトリ量子についてはほとんど語らなかったが、ロゴの意味「非対称性から生まれる物語」はアニメーションで紹介した。

4. アンケート結果

講演の評価をアンケート調査した。回答者36名のうち「とても理解できた」「よく理解できた」が5名ずつ計10名、「まあまあ理解できた」が15名であった。

「あまり理解できなかった」は10名、「まったく理解できなかった」は1名である。

これに対して「とても興味深かった」6名、「興味深かった」16名、「まあまあ興味深かった」9名と、興味は持っていただけたようである。「全く興味が持てなかった」が1名あり、これは「まったく理解できなかった」と同じ方かもしれない。誰にでもわかる話をするべく、今度も努力したい。

面白く感じていただければよいと思っていたので、 この結果には、講師としてまずまず満足である。「絶 対右」や「絶対左」というものはないため、左右性は なんとも掴み所がない。鏡像異性体の分子も、旋光 性やアミノ酸を表現する「きまり」がなければ、右と も左ともいえないのである。学ぶほどに右も左もわ からなくなってくるのである。

5. おわりに

講演の最後は「今日からみなさんはカイラルかそうでないかがわかる人になりました。世界が違って見えてきます。ちょうど図書館の入口にかざぐるまの展示がありました。右かざぐるまと左かざぐるまあること、風があたるとそれぞれ右と左にまわることに気がつくと思います。では、裏から風があたると、かざぐるまはどちらに回るでしょう?」と問いかけて締めくくった。講演中にクイズを5問出したが全問正解者には、方解石と偏光板2枚をプレゼントした。

方解石の複屈折や偏光の研究では、Christiaan Huygens (クリスティアーン・ホイヘンス) やDavid Brewster (デイビット・ブリュースター) も活躍している。まだ光が波とも粒子とも決着しておらず、波派

と粒子派の対立も面白い。名だたる19世紀の科学者 たちが自然を理解しようと格闘するさまには見習う べきところがたくさんある。

- [1] 中崎昌雄, 中京大学教養論叢, 37(3) (1997) 453.
- [2] 田賀井篤平, 地学雑誌, 131(2) (2022) 133146.
- [3] H. D. Flack, Acta Cryst. A65, (2009) 371.
- [4] J. Gal, Helvetica Chimica Acta, **96** (2013) 1617.
- [5] Lord Kelvin, "Baltimore Lectures On Molecular Dynamics and the Wave Theory of Light", Cambridge University Press, Cambridge (1904).
- [6] 大塚浩晨, 岡野俊行, 比較生理生化学, 40(3) (2023) 149.
- [7] 山梨県立宝石美術専門学校HP, https://www.pref.yamanashi.jp/houseki/jewelry/yokoso/index.html(2025年6月19日確認)
- [8] D. Arago, Mem. de l'Institut 12 (Part 1) (1811) 93.
- [9] J.B. Biot, Mem. Cl. Sci. Math. Phys. Inst. Imp. Fr., 13 (1812) 1.
- [10] J.F.W. Herschel, Trans. Cambridge Philos. Soc., **1** (1822) 43.
- [11] L. Pasteur, Ann. Chim. Phys., **24** (1848) 442.
- [12] J.A. Le Bel, Bull. Soc. Chim. Fr. **22** (1874) 337.
- [13] J.H. Van' t Hoff, Arch. Neerl. Sci. Exact. Nat. 9 (1874) 445.
- [14] Chem-station HP 「酒石酸にまつわるエトセトラ」 https://www.chem-station.com/blog/2015/11/tartaricacid.html(2025年6月19日確認)
- [15] L. Pasteur, Compt. Rend., 46 (1858) 615.
- [16] Annick Perrot 『パスツールと微生物 (ジュニアサイエンス)』丸善出版 (2013).



アシンメトリから生まれたセレンディピティ? 「極低温で軟かくなる人工ダイヤモンド」

柳澤 達也

北海道大学大学院理学研究院 教授

ダイヤモンドは炭素原子が共有結合し、文字通りダイヤモンド構造(図1)をとる、この世で最も硬い鉱物です。モース硬度は最大値の10、体積弾性率(バルクモジュラス)は463 GPaであり、超硬合金タングステンカーバイドの値(319 GPa、モース硬度は9)や、強相関電子系の典型物質CeB6の値(175 GPa)等と比べても、その突出した硬さがわかります。しかしながら、硬いからといって安定かというとそうではなく、高温高圧状態からクエンチして作られるダイヤモンド構造は準安定相であり、常圧では黒鉛が安定相です。

硬いということは音速も速く、縦波の音速は秒速 17.5 kmを超えます。私の専門は物質に超音波を入射して音速を測定し、弾性 (スティフネス) 定数から量子状態の情報を得る研究ですが、最近、この最も硬い物質を測定してみると、極低温で軟かくなる現象 (ソフト化) を発見しました。慧眼なる本ニュースレター読者は、「ああ、それは原子空孔の仕業だね」と察知されたかもしれませんが、その起源は未だ解明されておりません。詳しい研究内容については論文[1]に譲るとして、本コラムではその発見に至る過程と、それにまつわる裏話をご紹介します。

本研究の動機は20年前に遡ります。イギリスの登山家が遺した「エベレストに登る理由」よろしく、「そこに最も硬い物質があったからだ」、と言えたら格好良かったですが、指導教員の後藤輝孝先生が産業ベースのノンドープSi単結晶において極低温の弾性ソフト化を当時発見されたのが契機でした[2]。Siもダイヤモンド構造であり、ソフト化の起源は単一原子空孔が有する電気四極子自由度であることが判っ

ています。日本のお家芸である半導体「ウエーハ」製 造メーカが「完全結晶」と称して取引している産業 ベースの純良単結晶にも、高温育成時に原子空孔が 導入されてしまうのは熱力学的必然です。業界では それを逆手にとり、原子空孔に不純物を捕獲(ゲッ タリング) させ、アニールで析出し除去する技術が用 いられています。同様に、高温高圧で作られるダイ ヤモンドにも原子空孔由来のソフト化が生じること を予見するのは自然な流れでした。しかし当時は実 行に移す強い意志もお金もないまま月日が流れ、コ ロナ禍の緊急事態宣言で実験が完全に停止し、私が 自暴自棄になったことが次の契機となります。登山家 がエベレストを目指す様に、「ダイヤモンドを測定し てから死のう」と誓った私は民間の研究助成金に応 募し、運良く採択され、まずは資金を整えました。次 に、高精度の実験をするには質の高い人工ダイヤモ ンド (Type IIa) を手に入れなければなりません。人 エダイヤモンドを製造販売しているメーカーはいく つか存在したので、専門家に訊いてみたところ、ロ シア企業が高温高圧(HPHT)合成の手法で育成した 高品質の単結晶を販売しているとの情報を得たの で、早速購入しました。ロシアから宝石を輸入する際 は前払いが前提であり、ロシアの銀行にドル建てで 国際送金し、入金確認後物品が送られてくるというリ スクのある方法でした。余談ですが、当時提示され た0.16カラットの人工ダイヤモンド単結晶の見積額 に発注時の為替レートを乗じると[3]、当時の研究費 残額の1円の桁までぴったり一致するという、目を疑 うような偶然 (?) が起こり、もしかしてPCがロシア にハッキングされているのではないかしら?と「恐口

シア」な精神状態に追い込まれましたが、否、これは きっと「ダイヤモンドを測れ」いう神の啓示なのだ、と 自分に言い聞かせました。無事試料が届いた直後に ウクライナ戦争が勃発し、経済制裁により日露間での 直接の国際送金ができなくなりました。(その後、ロシ アから「オフィスを香港に移動したので、引き続きよ ろしく!」という軽いトーンのメールが届き、経済制裁 の実効性に疑問を感じた次第です。それ以降は付き 合いがありません。)

さて、ちょうどその頃、富山県立大の谷田さんから CeCoSiの仕事を依頼されておりました。この物質は 軟かくて、劈開し易くて、なおかつ薄い(~0.4 mm) という、とても音波屋泣かせの試料です。薄い(c面 直) 方向に超音波を入射すると、エコー間隔が狭く なりすぎて分離できず、面内方向に超音波を入射す ると、圧電素子と試料の接着面が小さく、モードが混 ざって干渉してしまうので苦心していました。そこで 思いついたアイデアは「ダイヤモンド」を遅延ライン として用いる手法です。即ち、弾性定数が既知のダ イヤモンド単結晶に、薄い試料を貼り付けてそれら を伝搬する音速の位相を丸ごと比較することで、オ シロスコープ上で信号の分離を可能にする技です。 これが功を奏し、構造相転移に伴う大きな弾性ソフ ト化と、パルス強磁場下での相転移を観測すること ができました。閑話休題。このようなセレンディピ ティもありましたが、遅延ラインのバックグラウンド を差し引くためにはダイヤモンドの弾性定数を低温 までキッチリ測っておかなければなりません。過去 の文献を調べてみると、実は10 K以下の弾性定数を 報告した論文が無いことに気づき、武者震いしまし た。希釈冷凍機を使って、蓋を開けてみれば、1 K以 下で温度に反比例した美しいソフト化が現れました (図2)。このソフト化は磁場に対して鈍感のため、非磁性の量子基底状態が持つ電気四極子自由度の存在を強く示唆するものですが、過去に光学実験等で認識されている原子空孔の量子基底状態[4]とは矛盾する結果であり、その起源はまだ謎に包まれています。今後はアクセプタ不純物であるホウ素をドープしたブルーダイヤモンドを測定し、ソフト化の起源を明らかにする予定です。

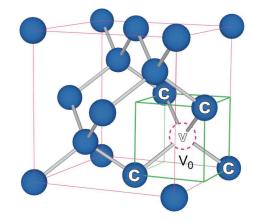


図1 ダイヤモンド構造と中性原子空孔 (サイトシンメトリーは Ta)

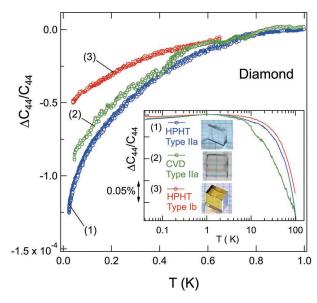


図2三種類のダイヤモンドの弾性ソフト化[1]

^[1] Tatsuya Yanagisawa, Ruo Hibino, Hiroyuki Hidaka, Hiroshi Amitsuka, Toshiyuki Tashima, Mitsuhiro Akatsu, Yuichi Nemoto, Sergei Zherlitsyn, and Joachim Wosnitza, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 073602 (2025); also featured on JPS Hot Topics **5**, 035 (2025).

^[2] Terutaka Goto, Hiroshi Yamada-Kaneta, Yasuhiro Saito, Yuichi Nemoto, Koji Sato, Koichi Kakimoto, and Shintaro Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 044602 (2006)

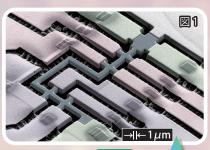
^[3] Estimated Value: 2338.00 USD, Exchange Rate: 116.4396 JPY/USD.

^[4] Gordon Davies, Simon C. Lawson, Alan T. Collins, Alison Mainwood, and Sarah J. Sharp, Phys. Rev. B 46, 13157 (1992)

非物理の人に非対称性が彩る物理の面白さを伝える

ゆるい科学コラム

「ミクロな型抜きで 応答1万倍!」の巻



アシンメトリ量子のサイトに載っとる縁日の型抜き (かたぬき) みたいなやつ(図1)、あれ何なん?

鬼丸



型抜きを知っているとは!

量子さんはもしかして昭和生まれですか? ちなみにこの写真の 溝の幅は1マイクロメータなので(図2)、難易度高めですね。

冗談じゃけーw

(ちなみにウチは平成生まれじゃけん!) なんか電気回路っちゅうのは知っとるんよ。 これって、半導体の上に光で 回路のパターン描いとるやつなん?

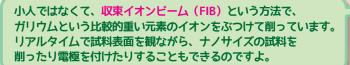


(

それはフォトリソグラフィーのことですね。 しかし、この回路はそれとは異なる方法で作られたものです。 まさに「型抜き」みたいに、試料を直接ガリガリ削って 作ったのですよ。



まじなん?1マイクロメートルゆうたら、1ミリの1000分の1じゃろ? コロポックルさんが、わっせわっせ言いながら削っとるんかね~?







ほんじゃったら、手ぇが不器用なウチでも、 米粒の上に般若心経ぐらいサラッと書けるってことじゃね!



高価な装置なので、写経したら納税者の皆さんに怒られちゃうかも しれませんね。ただ、このFIB装置は共同利用可能ですので、 本研究領域の発展に資するならどなたでもウェルカムです!



ぶちヤバいけー!これ縁日に持ってって、型抜き全クリしたろ~!

それはズルいからだめ!



うろたんの豆知識コーナー

FIBを使う利点はいろいろあるニョロ。アシンメトリ量子では、試料の単一ドメイン領域を削り出したり、試料の 微細化により、最大でバルク実験の1万倍の電流密度を使って測定精度を桁違いに増大させることに挑戦してるニョロ。 試料の三次元的な加工も可能ニョロ。実際に3D-NANDメモリーのデバイス解析などに応用されているニョロ。



共鳴X線回折を用いたEu 化合物の磁気秩序の観測

鈴木 大斗

広島大学先進理工系科学研究科 博士課程後期3年

Eu化合物の磁気構造を決定するために、広島大学の松村武教授のご指導のもと、KEK PF BL-3Aにて共鳴X線回折実験を行いました。Euは中性子の強い吸収体であるため、中性子回折による磁気構造の決定は困難です。そこで、共鳴X線回折を用いて偏光解析により磁気構造を決める手法の習得を目指しました。

今回の実験で強く感じたことは、事前に実験室で 準備することの重要性です。今回のセットアップで は、結晶の主軸を散乱面に対して±3°の範囲に収め つつ、試料の表面を鏡面研磨する必要がありました。 そこで、単結晶サンプルを回転させて、複数の方向 からラウエ写真を撮ることで、軸の傾きを正確に評 価しました。

KEKでの実験では、共鳴X線回折のための回折計の巨大さに驚き、またそれを自在に操る松村教授に圧倒されました。事前に準備していたサンプルをセットして磁気反射の探索をスタートし、幸いにも、ビームタイムが終了する15分前に磁気反射を発見できました。この磁気反射が転移温度以上になると消えることを確認できたときは、とても興奮しました。

その後、2025年5月にも実験を行い、偏光解析や、移相子を用いたヘリシティの評価など、共鳴X線ならではの実験を行い、よいデータを得ることができました。

この経験を通して、実験室での準備の大切さと量子ビーム実験の大変さを実感しました。今後も解析を進め、磁気構造とそれに伴う物性についての考察を深めていきたいと思っています。最後に、今回の実験に関わっていただいたすべての方々に心より感謝申し上げます。



キャパシタンス式 ファラデー法による ホルミウム系化合物の 極低温磁化測定

北澤 崇文

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 博士研究員

スキル相伝プログラムによるご支援のもと、2024年11月11日~18日に、ホルミウム(Ho)系化合物の極低温磁化測定を広島大学の磁性物理学研究室(C01鬼丸グループ)にて行いました。我々が研究を進めているHo系化合物において、ゼロ磁場で新たに0.6 K付近で相転移が起こることが比熱・電気抵抗から分かったため、転移付近での磁気特性を調べることを目的として、3He冷凍機を用いたキャパシタンス式ファラデー法による精密磁化測定を行いました。実験では、志村恭通准教授(公募班D01)からご指導いただきました。

私自身は、学部4年のときに当研究室に所属しておりましたが、当研究室でファラデー法による磁化測定の経験は無かったため、見慣れた実験室に居ながら新鮮な実験ができました。実験手順や冷凍機の扱い方を習得することは想定内でしたが、2日目に磁場勾配マグネットの電源装置が故障して、急きょ新品の電源装置の立ち上げ作業に携わるという想定外の経験もあり、激動の1週間となりました。実験は無事に成功し、当初予定していた磁化の温度変化と磁場変化をすべて測定することができました。

志村先生、鬼丸先生をはじめ、お忙しいところ温かく受け入れてくださった磁性物理学研究室の皆様に深く感謝を申し上げます。今後は、極低温磁化を含む物性測定の結果をもとに、Hoサイトの4f電子の基底状態に関して考察を深めていこうと思います。



高エネルギー光電子分光による高圧合成白金酸化物のバルク電子構造の解明

小林 康仁

大阪大学基礎工学研究科 博士課程後期2年

立命館大学SRセンターにて3日間、私が高圧合成 法によって発見した新規白金系酸化物の複雑な価数 状態を実験的に解明することを目的として、関山研 究室(A01班)の藤原先生をはじめ、今田先生、入 澤先生(立命館大学)のご協力のもと、軟X線・硬X 線光電子分光の実験を行いました。

測定対象となる物質の性質やサンプルクオリティの点から、はじめは有益なデータが得られるか不安もありました。しかし、藤原先生のご提案やご指導のおかげで、新物質の詳細な電子状態を解明する上で重要な手がかりを得ることができました。この過程を通じて、自身が発見した新物質の誰も分かっていない電子状態の正体を自ら追求する面白さを実感することができました。さらに、スパッタリングや劈開など、質の高いデータを得るための表面処理の技術的工夫に驚かされる場面もありました。この貴重な経験は、今後の物質開発において、よりクオリティの高いサンプルを作るための大きなモチベーションになると感じています。

今回のスキル相伝プログラムは、領域全体会議の 期間中に、藤原先生に「光電子分光でこれが可能か どうか」を尋ねてみたことがきっかけで実現しまし た。光電子分光に馴染みのない学生である私に対し ても、やる気さえあれば丁寧にサポートしていただ けること、さらにそれを全面的にバックアップしてい ただける本領域の恵まれた環境のありがたさを、こ の3日間で実感しました。最後に、今回の実験に関 わっていただいたすべての方々に心より感謝申し上 げます。



職人技に触れた 超音波実験

小田 一瑛

広島大学大学院先進理工系科学研究科 博士課程前期2年

スキル相伝プログラムにより、4f²配位のPr³+イオンを含む金属間化合物の弾性定数を測定するために、北海道大学大学院理学研究院のJマテリアル強相関物性研究室にて、超音波実験を行いました。私の研究対象とするPr化合物については、先行研究で矛盾する複数の結晶場モデルが提案されていたため、正しい結晶場基底状態を決めることが目的です。超音波実験では、柳澤先生と博士課程の日比野さんにご指導いただきました。

実験で特に印象に残っているのは、試料にトランスデューサを貼る作業です。厚さ1mm以下の試料に正確にトランスデューサを貼り付ける柳澤先生の技術はまさに職人のようで、その卓越した技に圧倒され、感動しました。こうした測定の準備から計測機器のセッティング、データの読み取り方に至るまで丁寧に教えていただき、大変貴重な経験となりました。

今後は、学んだスキルを自身の研究にも活かせるように、研究に励んでいきます。また、今回得られた弾性定数のデータを解析して、結晶場基底状態の解明を目指します。最後に、貴重なお時間を割いてご指導くださった柳澤先生と日比野さんに、心より感謝申し上げます。



2025年10月からの関連行事

HVAR 2025: International Conference on Strongly Correlated Quantum Materials (ICSCQM)

日時: 2025年10月12日(日)~17日(金)

場所:Hvar, Croatia

URL:https://hvar2025.ifs.hr アシンメトリ量子共催

■ 第 19 回物性科学領域横断研究会 凝縮系科学の最前線

日時: 2025年11月27日(木)、28日(金)

場所:東京大学物性研究所 アシンメトリ量子主催

■ 令和7年度 領域全体会議・成果報告会議

日時: 2026年1月6日(火)~8日(木)

場所:名古屋工業大学アシンメトリ量子主催

■ 日本物理学会

日時: 2026年3月23日(月)~26日(木)

オンライン開催

事務局からのお知らせ

■ 謝辞記載のお願い

本学術変革領域に関する業績には、以下の謝辞の記載をお願いいたします。

■ 記載例は次のとおりです。

【英文】:This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Number JPXXXXXXXXX.

【和文】:本研究はJSPS科研費 JPXXXXXXXXの助成を受けたものです。

(※XXXXXXXXは課題番号)

■ 計画研究の課題番号と課題名の対応は次のとおりです。

23H04867 A01:量子ビームによるアシンメトリ量子物質のミクロ解析

23H04868 A02:精密物性測定によるアシンメトリ量子物質の新機能開拓

23H04869 B01:アシンメトリ量子物質の基礎理論と設計

23H04870 C01:アシンメトリ量子物質の深化 23H04871 C02:アシンメトリ量子物質の開拓

23H04866 X00: アシンメトリが彩る量子物質の可視化・設計・創出の研究総括

(※ 共用機器の利用、国内旅費援助・海外派遣で得られた成果の場合、こちらも含めてください。)

■ 公募研究の課題番号と課題名の対応は次のとおりです。(括弧内は研究代表者名)

24H01670 顕微スピンARPES でプローブする反強磁性秩序の実空間・波数空間相関(木村 昭夫)

24H01685 軟X線吸収・散乱による拡張磁気多極子観測手法の開拓(山崎 裕一)

24H01644 対称心のない欠損スピネル化合物における分子多極子軌道の直接観測(鬼頭俊介)

24H01640 非対称な熱流とその交差相関の開拓(水上雄太)

24H01646 バルク超伝導体を用いた巨大超伝導交差応答の研究(石原 滉大)

24H01659 ベクトル圧力:一軸圧力回転装置の開発と実証(池田 敦俊)

24H01638 量子アシンメトリ物質における熱・弾性交差相関現象の開拓(小野瀬 佳文)

24H01639 アシンメトリ量子の検出・可視化手法の開発と人工アシンメトロニクスへの展開(松原 正和)

24H01663 電流下で顕在化する多極子アシンメトリ応答の光技術観測 (米澤 進吾)

24H01675 準結晶と近似結晶における奇パリティ結晶場と多極子の開拓(渡辺 真仁)

24H01662 ミクロな非対称性が誘起する超伝導非相反現象(大同 暁人)

24H01668 Microscopic theory for cross-coupled ferroic orders in chiral magnets (Harald O. Jeschke)

24H01649 電子自由度のアシンメトリによるトポロジカル相制御(上田健太郎)

24H01673 軸性アニーリングによる強相関非対称物質の創製(志村 恭通)

24H01641 局所的に空間反転対称性の破れたウラン化合物の物質探索と超伝導(青木大)

24H01650 カイラリティ自由度をもつ拡張ハニカム型無機有機ハイブリッド物質の開発(石川 孟)

24H01666 原子レベルで制御された空間アシンメトリに起因する磁気相互作用(松野 丈夫)

24H01652 表面非対称電子軌道の制御による非相反伝導特性の最大化(金澤 直也)

24H01654 交替磁性揺らぎによる超伝導発現の実証(打田 正輝)



編集後記

#05が発刊される頃には、本領域もいよいよ後半戦に突入し、徐々にゴールと波及効果を意識し始める時期に入っていることでしょう。我々ニュースレター編集委員も、これまでは「アシンメトリ量子」のアイデンティティ、即ち核心部がどこにあるかを探るべく意識を内に向けて歩んできた感がありましたが、徐々に成果が積み上がったことで、外へ向けた発信に意識を広げる余裕が生まれてきたように思います。その兆しは前号の研究室紹介あたりから見え始め、今号では解説記事に加えて非専門家向けのコラムが数多く収録されました。

巻頭言でも触れられているように、山梨県立図書館での大原先生による市民講演は大変盛況で、まさにアシンメトリ量子と非専門家の化学反応を目の当たりにすることができました。さらに、これに続いて開催されたトピカルミーティングでは、ホストとしてで尽力頂いた鳥養先生のおもてなしの心に大変感銘を受け、あらためてサイエンスにおける人と人の繋がりの大切さを実感することができました。ニュースレターもまた、人と人の繋がりや社会との対話を意識しつつ、研究者としての探究心を深める場として貢献できればと思います。



アシンメトリが彩る量子物質の可視化・設計・創出

文部科学省科学研究費補助金「学術変革領域研究(A)」(令和5年~9年度)

領域番号:23A202

学術変革領域研究(A)

「アシンメトリが彩る量子物質の可視化・設計・創出」ニュースレター 第5号

2025年9月 発行 編集人 田端 千紘 発行人 鬼丸 孝博

発行所 広島大学大学院先進理工系科学研究科

TEL: 082-424-7027

事務局 岡山大学異分野基礎科学研究所

大槻 純也

TEL: 086-251-7804



https://asymmetry.hiroshima-u.ac.jp/

