



相互作用で広げる表面を 舞台とした固体物理

みなみに・えみ

2010年に大阪大学工学研究科応用物理学専攻で博士(工学)を取得したのち、理化学研究所基礎科学特別研究員、東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻助教、同講師を経て2019年4月から分子科学研究所の准教授として着任しました。また、2017年10月よりJSTさきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」領域にて、さきがけ研究員を兼任しています。

2019年4月1日付けで分子科学研究所の理論・計算分子科学研究領域に着任いたしました。まだまだ、分子研や岡崎・名古屋エリアに不慣れではありますが、皆様に助けをいただいで、研究室の引っ越しや整備・立ち上げが進みつつあります。所内の関係者の方々にこの場を借りて御礼申し上げます。

自己紹介として、私の分子研着任までの経歴や研究内容を簡単に紹介させていただきたいと思います。私は小中高大のすべてを出身地大阪で過ごしました。研究のバックグラウンドは固体物理学・表面科学です。学生時代は大阪大学工学研究科応用物理学専攻の笠井秀明先生の指導の下、酸化物の磁性や、金属中や表面の磁性不純物によって生じる量子多体効果、近藤効果の研究を行っていました。分子科学とは相当に縁の遠そうなテーマです。分子と接点ができただけの思い返せばちょうど10年前の夏です。その頃、私は博士3年生として学位論文を書いていました。当時はリーマンショックの余波が色濃く残っており、企業への就職・アカデミアのポジションをめぐる状況は実に芳しく無く、私は博士号をとった後のキャリアについて悩んでいました。

研究職にはつけないだろうと想定して、学位論文と並行してLinuxや並列コンピューティングの勉強などをしていたことを思い出します。そんな夏のある日、当時、東京大学新領域創成科学研究科に居られた川合眞紀先生のグループの高木紀明先生が、笠井研究室を訪問され、セミナーが開催されました。その際に、高木先生が紹介された研究が、磁性原子を含むようなフタロシアン錯体類を金属表面に吸着させると、近藤効果が生じ、それを走査トンネル顕微鏡で精緻に観測できるというものでした。フタロシアンという分子の名前すら当時は知らなかったのですが、4回対称性をもった綺麗な形の印象深さと、原子と分子では何が違ってくるのかという素朴な疑問から、博士課程での近藤効果の研究を分子系に応用できないか興味を持つようになりました。

その後、高木先生たちとディスカッションを重ね、共同研究を始めたこともあって、その次の春の物理学会で、川合研の飲み会に参加する機会がありました。その時に出会ったのが、後の上司となる理化学研究所の金有洙先生です。金先生は高いテンションで「研究職になるなら一刻も早く一国一城の

主、PIにならないといけませんよ!」という激励(?)と、理化学研究所の基礎科学特別研究員制度の紹介と勧誘をしてくださいました。PIになることなど想像もしていなかった自分にはインパクトのある出会いでしたし、基礎特研の制度も素晴らしいと思ったので、飲み会での勧誘を本気にして金先生の研究室を受け入れ先にして応募した結果、実験グループで理論研究を行うという珍しい機会を得ました。理研では伸び伸びと研究ができ、「原子と分子では何が違うのか」という自分の興味を、分子のもつ対称性による軌道自由度とスピン自由度が結びついた特殊な近藤効果の発見につなげることができました。また、研究室ミーティングなどで紹介される実験結果を見ているうちに、振動分光に興味を持つようになりました。そこで、フォノンや電子フォノン相互作用についての研究をスタートしました。理研で始めたこのテーマは2017年に採択されたJSTさきがけの課題の基盤となっています。

そうこうしているうちに、基礎特研の任期が近づき、次の職を探しているタイミングで、東京大学マテリアル工学専攻の渡邊聡先生から、女性教員公

募に応募しないかというお誘いをいただきました。その制度で採用された結果、2013年の12月から渡邊研究室の助教として働くようになりました。その約2年後に、講師に昇任し、本格的に教育にも取り組むようになりました。教員として学生指導をする中で、学生が意欲を持ってくれやすく・計算しやすく・結果が広く興味を持たれやすいテーマを探す必要が出てきました。これらの条件を満たす一つが層状物質でした。グラフェンや遷移金属カルコゲナイドに代表される層状物質は、ブームが始まってから10年以上経っていますが、今でも毎日のように新しい現象やその論文が出版されるホットな分野です。私は最初、流行り物だからと敬遠していたのですが、必要に迫られて調べたり、自分でも計算したりする中で、材料としてのバリエーションと優位性や、Berry位相やトポロジカル物性などの興味深いトピックスにもつな

がることを実感して、今では熱心に取り組んでいます。流行り物だと敬遠していたけれども、渡邊研で話を聞いているうちに、面白さに気づき最近取り組むようになったもう一つのテーマが機械学習です。渡邊研では学生指導を通じて新しいテーマに着手し、食わず嫌いを克服して知見を広げるよい機会を本当に沢山いただきました。

こうやって自分の研究歴を思い返してみると、新しい環境に飛び込み、人との相互作用を介して今まで知らなかったことに触れ、それを自分のコアである多体相関・表面科学に結びつけることで研究が広がっているように思います。分子研での新研究室の立ち上げが、平成から令和に時代が移り変わるタイミングということもあり、心機一転、さらに新しい要素を取り込みたいと考えています。また、研究室の立ち上げを始めて、所属していた研究室のPIがされていた研究室運営・環境

整備のありがたさ、大変さを実感するようになりました。これまでに在籍し、恩恵を受けていた素晴らしい環境を参考に、これからは自分がPIとして研究室メンバーが楽しく伸び伸び研究できる体制を作り、良い研究成果につなげたいです。

```

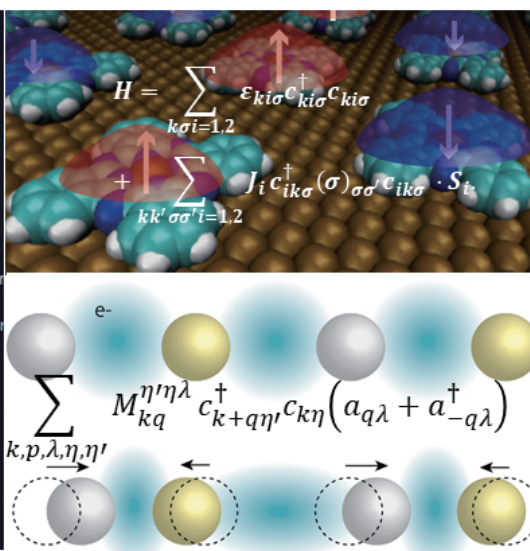
subroutine invariantMatrixForSpectrum
  use omp_lib
  use generall
  use parallel
  use hamiltonian, only: Basis_type ! type
  use hamiltonian, only: hami ! in
  use hamiltonian, only: invariant_matrix_spectrum ! inout
  use hamiltonian, only: subspaceInfo ! in
  use hamiltonian, only: basis_output ! in
  use hamiltonian, only: basis_input ! in
  use hamiltonian, only: numberOfSubspace ! in
  use hamiltonian, only: coefficient_invariant_matrix_spectrum
  use hamiltonian, only: eigenvector ! in
  use hamiltonian, only: conservation_difference_spectrum ! in

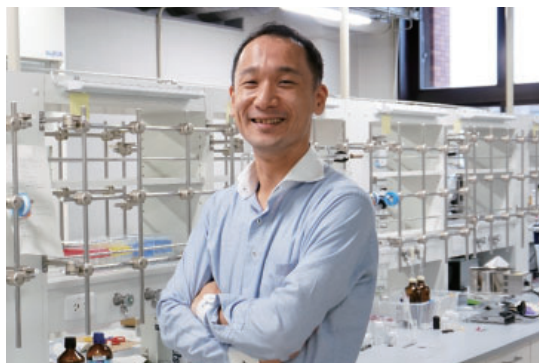
  implicit none
  include 'mpif.h'

  integer :: loadmin(0:numberOfProcess-1), myloadmin
  integer :: loadmax(0:numberOfProcess-1), myloadmax
  integer :: allload(0:numberOfProcess-1), myload

  integer :: ileft, iright

```





ラジカルで開拓する物性科学

くさもと・てつろう

2003年東京大学理学部化学科を卒業。2005年同大学大学院理学系研究科化学専攻修士課程を修了後、ソニー株式会社に勤務。2007年に退職し、東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程に入学。2010年に修了し博士（理学）の学位を取得後、理研での特別研究員、基礎科学特別研究員を経て、2012年に東京大学大学院理学系研究科特任助教、2013年同研究科助教。2019年より現職。2児の父。

2019年1月1日付で生命・錯体分子科学研究領域に着任いたしました。前職の東大では総勢40人ほどの賑やかな研究室に所属しておりましたが、対して静かで落ち着いた分子研の雰囲気も肌に合うようで、研究に真摯に向き合える環境の中で喜びとワクワク感に溢れています。つい1か月半前に研究室の改修工事が終わり、現在急ピッチで物質合成や物性測定の実験設備を整えているところです。研究室立ち上げにあたり、川合所長、繁政技術課長、内山係長、正岡准教授（現大阪大教授）をはじめ、多大なご支援を頂いた所内外の皆様にお礼申し上げます。本稿では自己紹介として私のこれまでの研究経歴をご紹介します。

私は東京大学理学部化学科の学部4年次と大学院修士課程の合計3年間、小林昭子先生のご指導の下、磁性と伝導性を示す π ラジカル塩に関する研究を行いました。当時の私はバンドとバイトに明け暮れ、勉強や授業に対してlowモチベな学生でした。小林研を志望したのも、小林研で合成されている金属錯体がカッコよかったから、という見た目重視の選択の結果です。一転、研究室に入ってから、新物質合成、

単結晶X線構造解析、磁性・電気伝導性の測定、文献調査など、研究に関わるすべてが面白く、グイグイと研究の魅力に引き込まれていきました。小林先生から、研究の面白さのみならず、自然科学の奥深さや奥ゆかしさ、それらに真摯に向き合う姿勢の大切さを学びました。私が分子研を知ったのもこの頃で、当時分子研に在籍されていた小林速男先生の研究室を訪問してセレン化合物を合成したり、外国人PDに話しかけるも英語が拙すぎて通じず悔しい思いをしたりしていました。

修士の学位を取得後、ソニー株式会社に就職しました。そのまま博士課程に進学する道もあったのですが、小林先生が近くご退職されること、また世間知らずな自分は一度社会の中で揉まれる必要があると自覚していたこともあり、この機会に社会にでることとしました。ソニーでは自分が頭でっかちであることに気づかされたりしながらも楽しみながら燃料電池の開発に打ち込んでいました。しかし、化学の基礎研究に没頭したい、もっと化学を楽しみたい、という気持ちが日に日に強くなり、思い切ってソニーをやめて大学院の博士課程に進学することにしまし

た。

当時の私は、「博士課程ではこれを研究したい」という具体的なアイデアがありました。それを東大理学部化学科の西原寛先生にご相談したさいに、「面白そうじゃない、やってください」と言って頂けたことがきっかけで、西原研で博士課程の研究を進めることとなりました。今考えると、修士を出て二年足らずの若輩者が、東大の教授に対し、「自らの持ち込みテーマをやりたい、これが面白いんだ」なんてエラそうなことをよく言えたもんだと思いますが（社会で揉まれ足りなかったかもしれません）、それを許容して下さった西原先生の懐の大きさに今も大変感謝しています。西原研では通常とは異なる電子状態（SOMO-HOMO逆転の電子状態）を有するラジカルを合成し、この電子状態ならではの化学・物理特性を創出する研究を進めました。研究はD2の頭で大きな壁にぶち当たり、思い描いていた通りにはいきませんが、西原研が得意とする電気化学や光化学の技術や考え方を身につけながら試行錯誤し、最終的には面白い研究成果を発表することができました。

博士の学位取得後は、縁あって理研

の加藤礼三先生の研究室でポストドクとして受け入れてもらえることになりました。加藤研は化学者と物理学者が文字通り肩を並べて分子性導体や磁性体の研究を進めている点が印象的な研究室です。私はBilayer構造というユニークな分子配列を有するアニオンラジカル塩の研究を進めました。化学者として実験技術やアイデアを自由に発揮しつつ物理学者と日常的に議論できる環境は刺激的で心地よく、充実した毎日を過ごしていました。加藤研では、物事のシンプルさと複雑さを理解することの重要性を認識すると共に、専門を異にする研究者との共同研究により新しいscienceを明らかにする楽しさを知ることができました。

2年半の理研でのポストドクの後、2012年に西原研に戻り特任助教として（2013年からは助教として）研究を進めることとなりました。「これを機に本質的に新しいラジカルの物性研究を立ち上げたい」という強い気持ちと共に、「色が変わる、鮮やかに光る、魅せる化学研究をやりたい」という思いがあり、自然と「光るラジカル」という研究テーマに辿り着きました。ラジカルの二重項に基づく蛍光発光は、通常の閉殻発光分子が示す発光とは異なる性質が期待されるものの、ラジカル

は一般には発光しない、また発光したとしてもすぐに分解してしまうため、研究が進んでいませんでした。西原研に移って3か月、発光を示す新しい安定ラジカルPyBTMを合成しました。特筆すべきはその光安定性で、PyBTMは既報の発光ラジカルよりも100倍以上高い光安定性を有していました。この光安定なPyBTMの開発を皮切りに、錯形成による発光ラジカルの機能増強やスピンと発光の相関に基づくmagnetoluminescenceの実現など、本質的に新しい物性を開拓できました。新しい発光ラジカルを作るたびに、専門を異にする研究者との新しい共同研究が始まり、専門外の難解な科学に頭を抱えつつも、学生達と共に日々成長を感じながら研究を進めることができました。

さて、分子研では新しい物性科学・分子科学を開拓すべく二つの基礎科学研究を展開したいと考えています。一つはラジカルの励起状態ダイナミクスの能動的制御による物性開拓であり、もう一つは閉殻電子系二次元ハニカム物質群の創製です。グラフェンは二次元ハニカム構造（蜂の巣構造）を有する単原子層厚みの炭素材料であり、その構造に起因する特異物性に着目して基礎と応用の両面から研究が進められ

ています。私は多座有機配位子として機能するラジカルと金属イオンとの錯形成反応を利用して、グラフェン様の二次元ハニカム構造を有する閉殻電子系二次元物質のボトムアップ構築に挑戦します。錯形成の特長は、有機配位子と金属イオンの組み合わせにより、多様な幾何構造と多彩な電子及びスピン状態を構築できる点にあります。この特長を活かして未だ化合物例が限られる二次元物質系に新しい物質群をもたらす、グラフェンなど既存の二次元化合物では実現困難な物性や電子状態の創出を目指します。

世界の分子科学を先導するこの研究所で、様々な刺激を受けながら、ユニークで革新的な科学を創出すべく日々精進していきたいと思っております。今後ともよろしくお願いいたします。

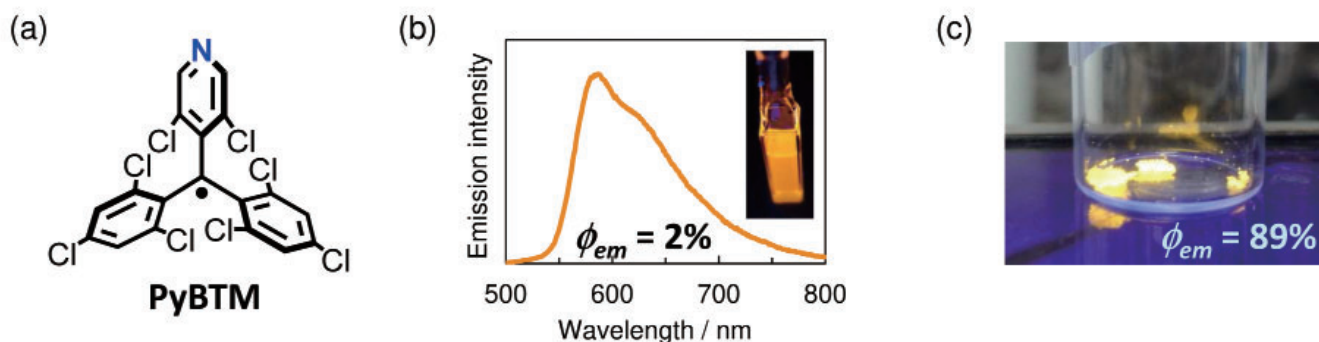


図 PyBTMの (a) 化学構造式、(b) ジクロロメタン中における発光スペクトルと発光の様子、(c) ドープ結晶の発光の様子。