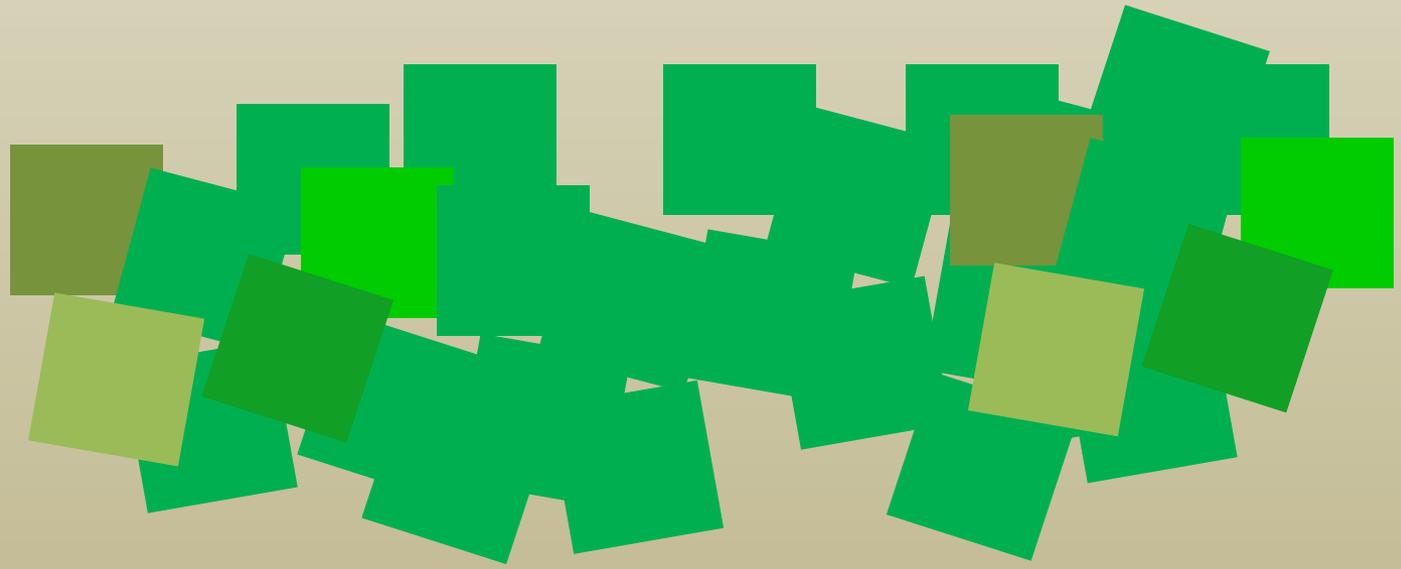


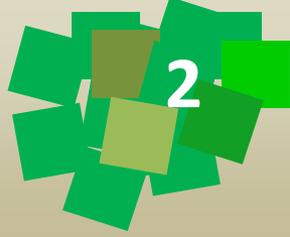
テラヘルツ帯分光研究室

筑波大学・数理物質系・物質工学域

森 龍也



内容



- ◆テラヘルツ光とは
- ◆テラヘルツ帯の物性研究
- ◆当研究室の取り組み

ガラス・テラヘルツ・数理科学



科学研究費助成事業「新学術領域研究(研究領域提案型)」平成29-33年度
次世代物質探索のための離散幾何学

メンバー専用 | サイトマップ

ENGLISH

HOME | 代表挨拶 | 研究概要 | 構成メンバー | 人材募集 | 活動状況

Discrete Geometric Analysis for Materials Design

数学、物質・材料科学の枠に取まらない融合領域の創成を目指す

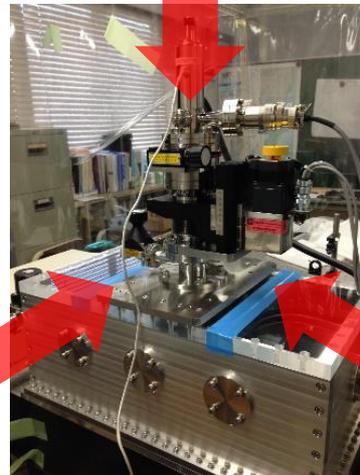
Glass

Innovations in Glass and
Glass Technologies:
Contributions to a Sustainable Society

ICG Annual Meeting 2018

59th Meeting on the Glass and Photonic Materials
14th Symposium of the Glass Industry Conference of Japan

PACIFICO Yokohama
Yokohama, Japan
September 23-26, 2018



- Key Dates
- Conference Schedule
- Venue
- Registration
- Sponsors and Exhibitors

THz

IRMMW-THz 2018

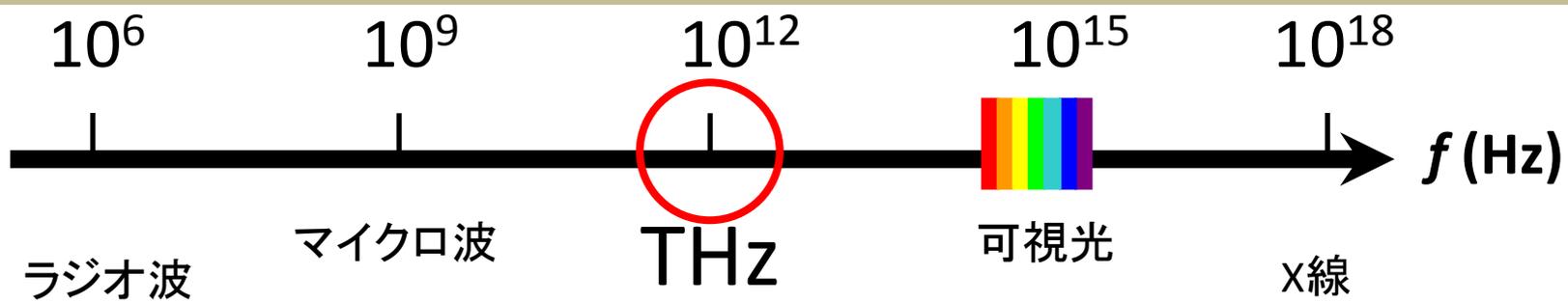
2018 43rd International Conference on Infrared,
Millimeter and Terahertz Waves
9 - 14 SEPTEMBER 2018
Nagoya Congress Center
Nagoya, Japan



テラヘルツ波とは



$$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$$



ラジオ波 (MHz)
ラジオ (FM ~ 80 MHz)
アマチュア無線
無線呼出しボタン
[1 MHz → 波長 300 m]

マイクロ波 (GHz)
携帯電話 (プラチナバンド ~ 800 MHz)
電子レンジ (2.450 GHz)
[1 GHz → 波長 30 cm]

テラヘルツ波・遠赤外線 (THz)
室温の輻射 (~ 6 THz)
光学フォノン (物質の指紋領域)
[1 THz → 波長 0.3 mm]
[テラヘルツ帯: 0.1 ~ 100 THz (1 THz = 4.14 meV)]
[波長 1000 μm - 25 μm (10 ~ 400 cm^{-1})]

中赤外線
光学フォノン
[波長 25 μm - 2.5 μm (400 ~ 4000 cm^{-1})]

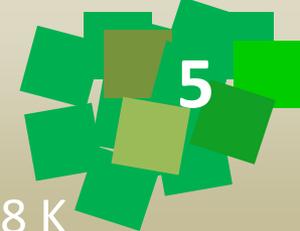
近赤外線
赤外線カメラ、赤外線通信、家電用リモコン
[波長 2.5 μm - 0.7 μm (4000 ~ 14000 cm^{-1})]

可視光線
750 nm (赤) ~ 380 nm (紫) (1.5 ~ 3 eV)

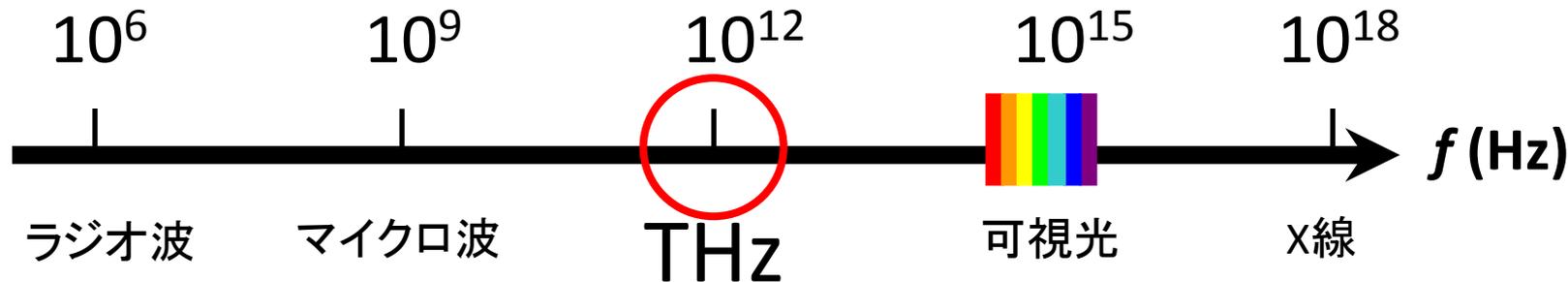
紫外線
400 nm ~ 10 nm (3 ~ 100 eV)

X線
波長 1 Å → 12.5 keV

テラヘルツ帯の物性

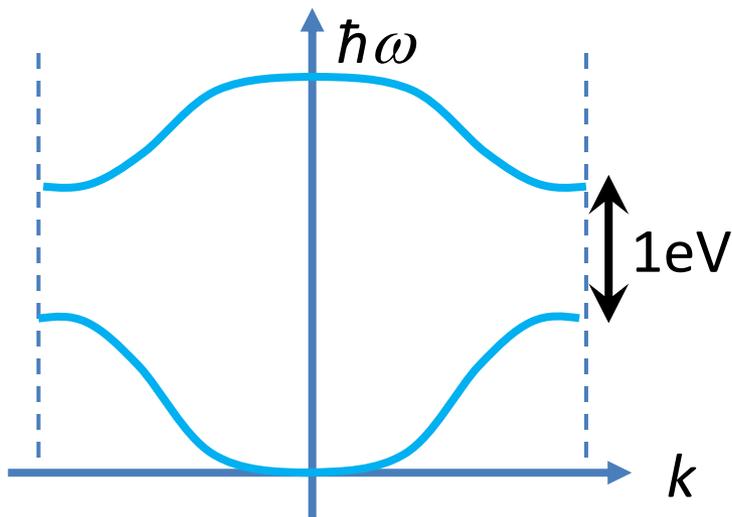


$$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$$

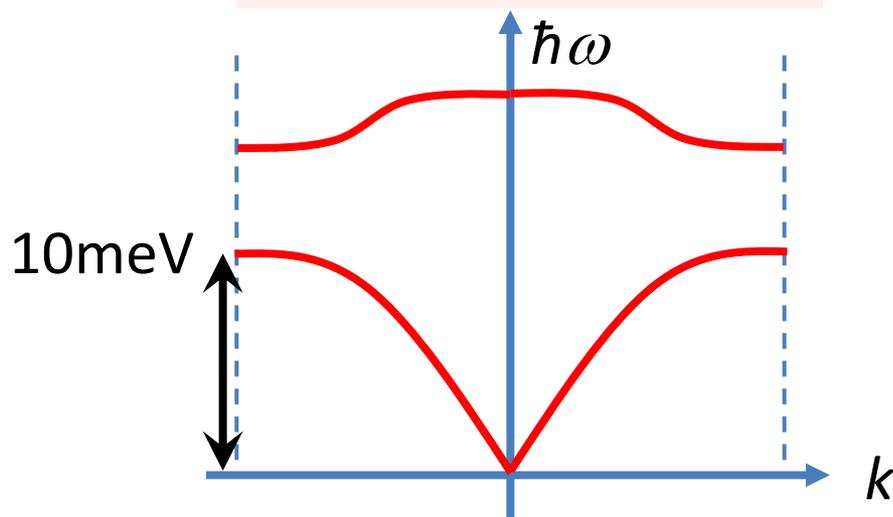


$$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$$

電子構造:
フェルミ準位近傍



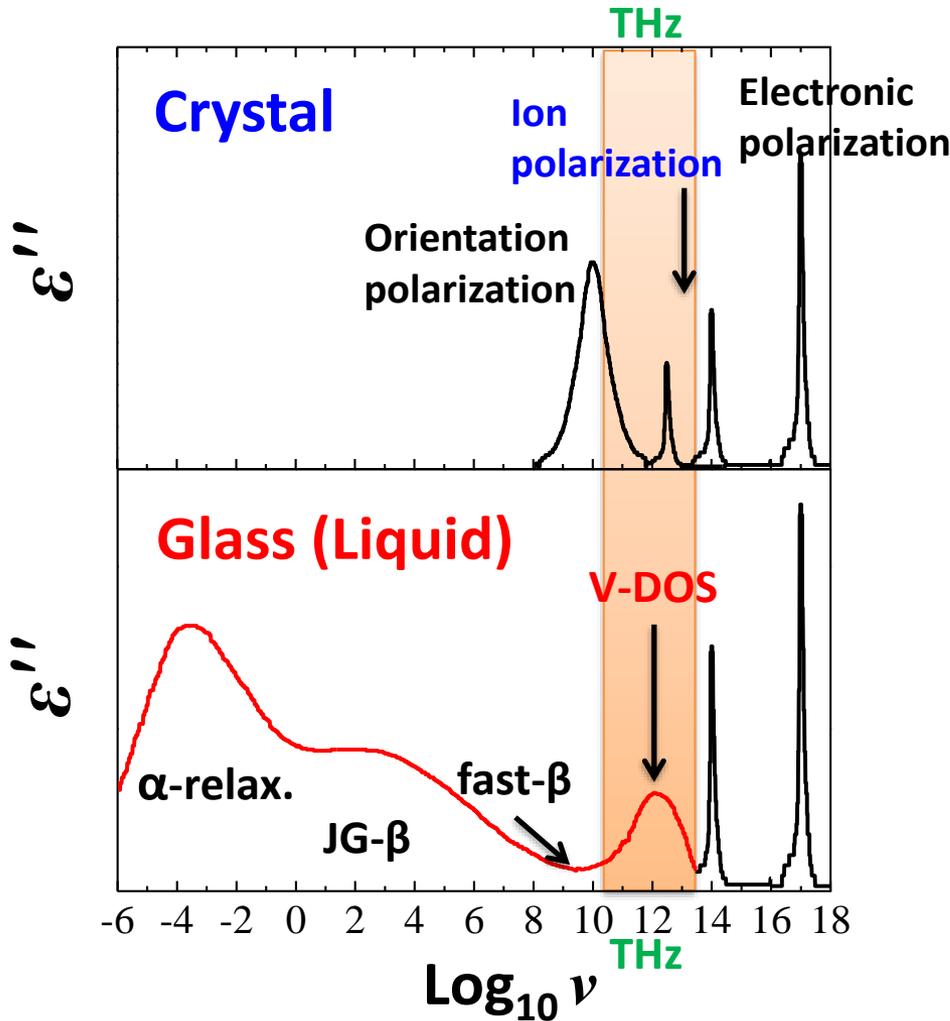
フォノン構造:
音響フォノンの終わり
低周波光学フォノン



原子の振動に着目した



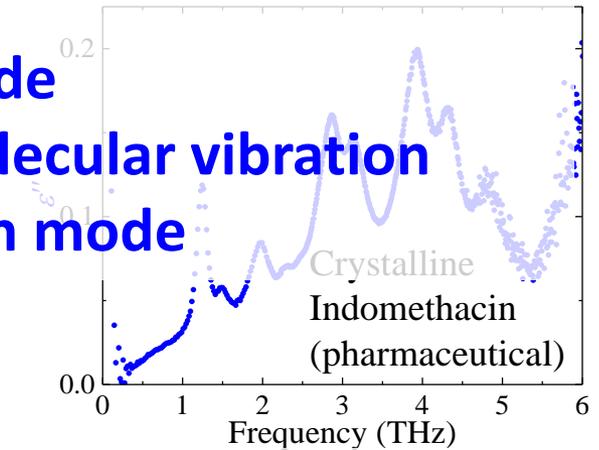
広帯域誘電スペクトル: THz帯の位置付け



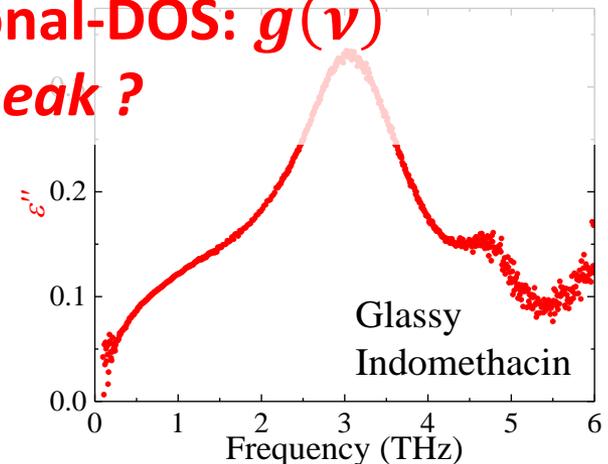
$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$

THz region

Crystal:
 Soft mode
 Intermolecular vibration
 Libration mode



Glass:
 Vibrational-DOS: $g(\nu)$
 Boson peak ?

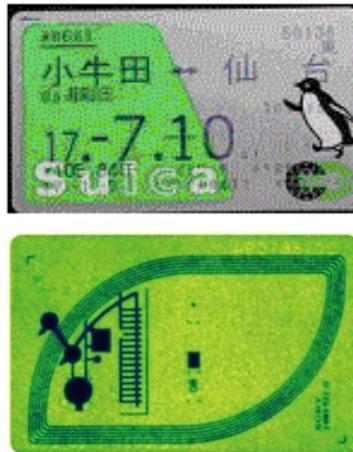


テラヘルツ波イメージングの例

(本ページの出典記載は割愛しています。)



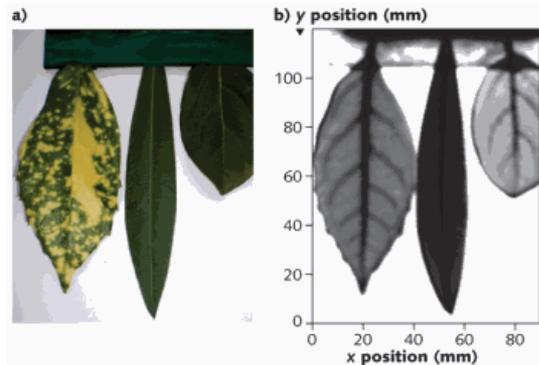
上は乾燥食品(エビ、唐辛子)の可視光画像、下はそれぞれのテラヘルツ波透過像



電子カードのテラヘルツ波透過像



テラヘルツ波の透過性と吸収スペクトルを用いた封筒内の違法薬物検出



Leaves are seen in visible light (a) and at 0.3 GHz in transmission imaging (b).



New terahertz tuner could find applications in security scanners.

粉体中の異物 Materials in powder

シリコン Silicon	ケイ素化合物 Silicon compound	ウレタン Urethane

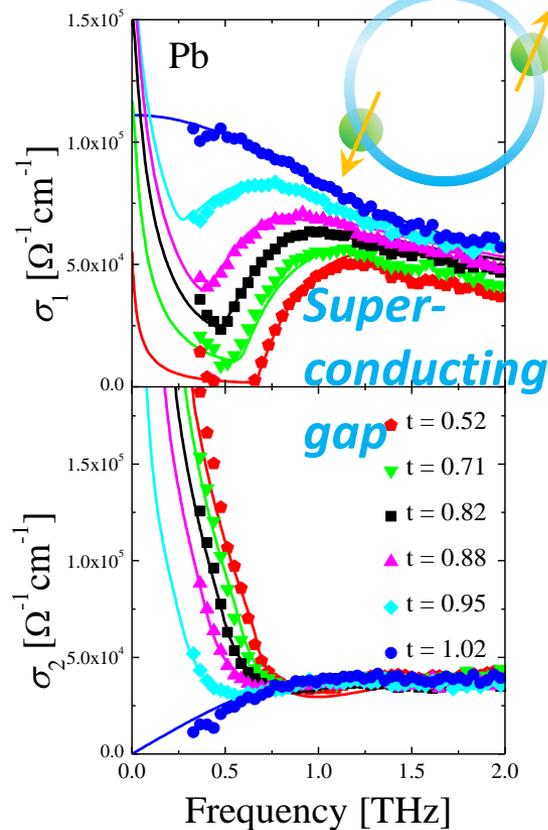
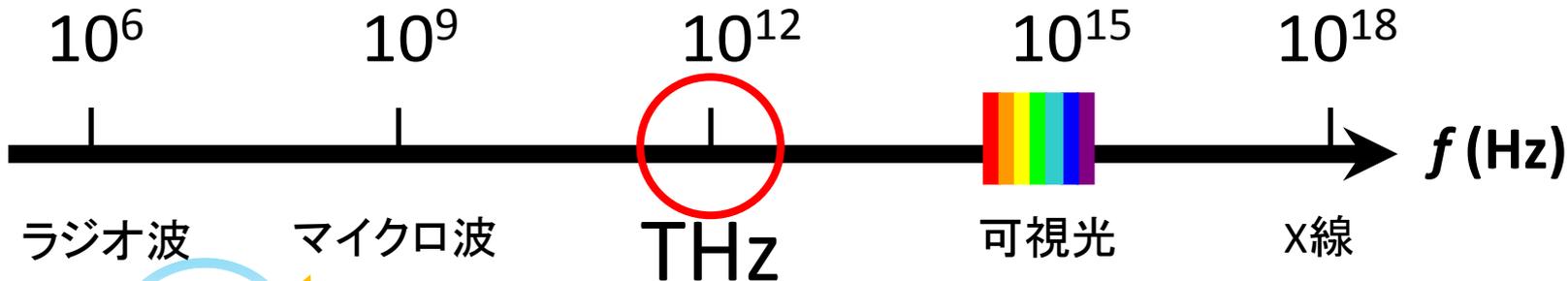
目視画像 Visual image

粉体: ラクトース
Lactose powder

T線画像 Terahertz image

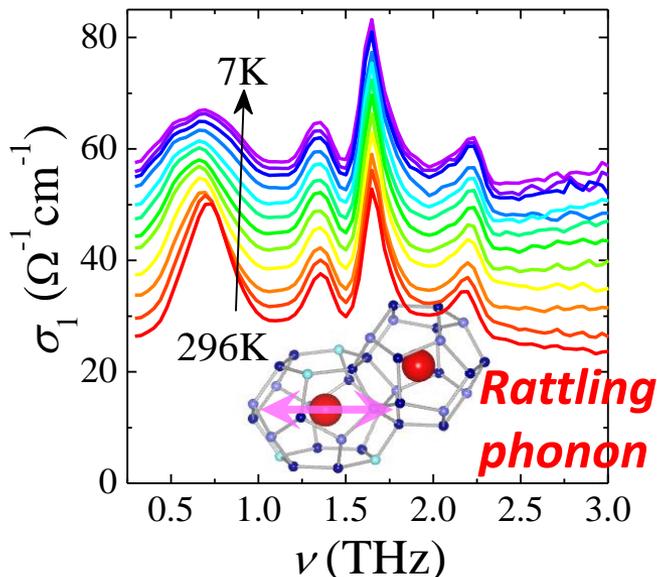
テラヘルツ帯の様々な励起

$$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$$

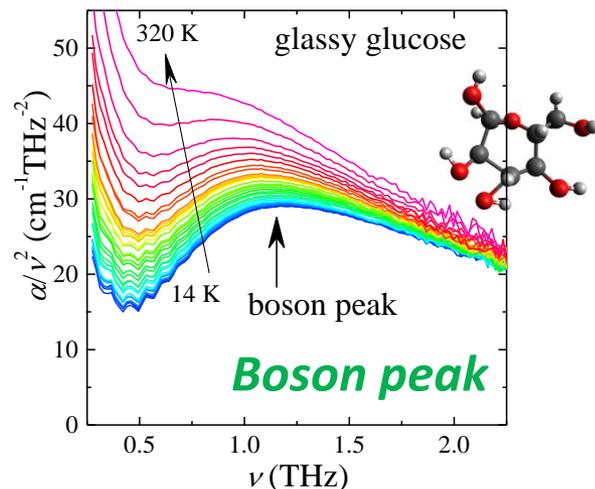


電子構造: 超伝導ギャップ, スピン密度波, 電荷密度波, エレクトロマグノン, ...

原子振動: 大振幅非調和振動(ラットリング), ソフトモード, 分子間振動, ...



ガラス状態: VDOSピーク, ボゾンピーク, ...



T. Mori *et al.*, PRB **77**, 174515 (2008).

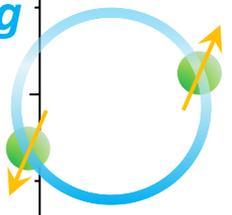
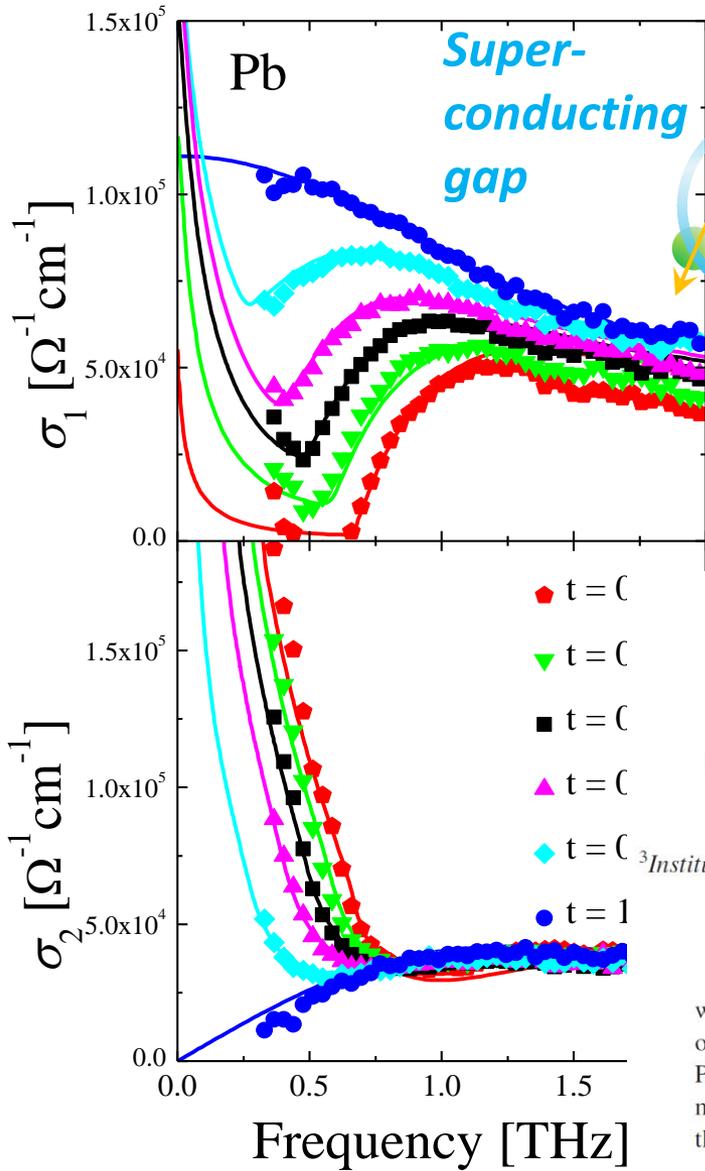
T. Mori *et al.*, PRL **106**, 015501 (2011).

M. Kabeya, T. Mori *et al.*, PRB **94**, 224204 (2016).

BCS理論50周年記念の 超伝導サマースクールでの出会い

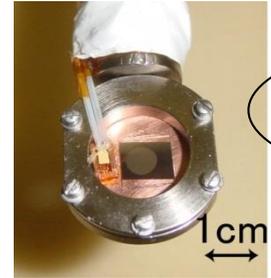


9



i like this data

Prof. J. P. Carbotte
(McMaster Univ.)



Theorists love to calculate
optical conductivity! ❤️



Prof. E. J. Nicol
(Guelph Univ.)

PHYSICAL REVIEW B 77, 174515 (2008)



Optical self-energy of superconducting Pb in the terahertz region

T. Mori,¹ E. J. Nicol,^{2,*} S. Shiizuka,¹ K. Kuniyasu,³ T. Nojima,³ N. Toyota,¹ and J. P. Carbotte⁴

¹Physics Department, Graduate School of Science, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan

²Department of Physics, University of Guelph, Guelph, Ontario, Canada N1G 2W1

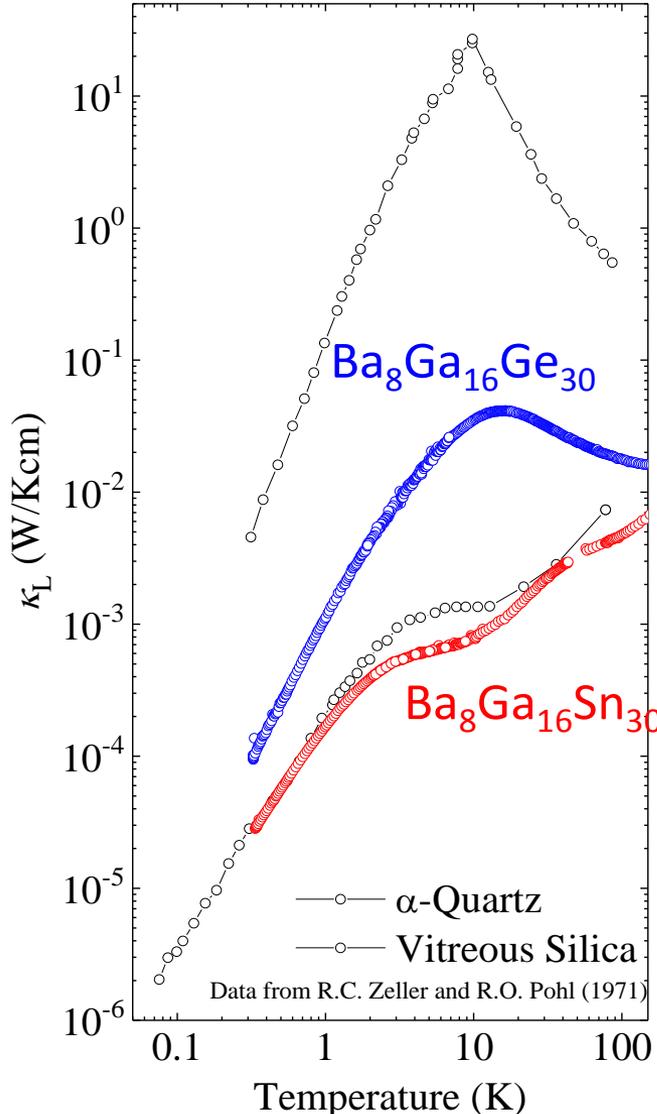
³Institute for Materials Research and Center for Low Temperature Science, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan

⁴Department of Physics and Astronomy, McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada L8S 4M1

(Received 5 March 2008; revised manuscript received 6 May 2008; published 28 May 2008)

New terahertz data on the optical conductivity of Pb are presented, as well as a detailed Eliashberg analysis with particular emphasis on phonon-assisted processes not included in a BCS approach. Consideration of the optical self-energy instead of the conductivity itself helps highlight the differences with BCS predictions. Predicted coherence peaks are observed in the optical scattering rates. Impurities enhance the optical effective mass at zero frequency by an order of magnitude and induce a large peak at twice the gap in agreement with theory. This work illustrates the usefulness of the optical self-energy for the analysis of data.

ラットリングフォノンと「単結晶に見られるガラス的熱物性」

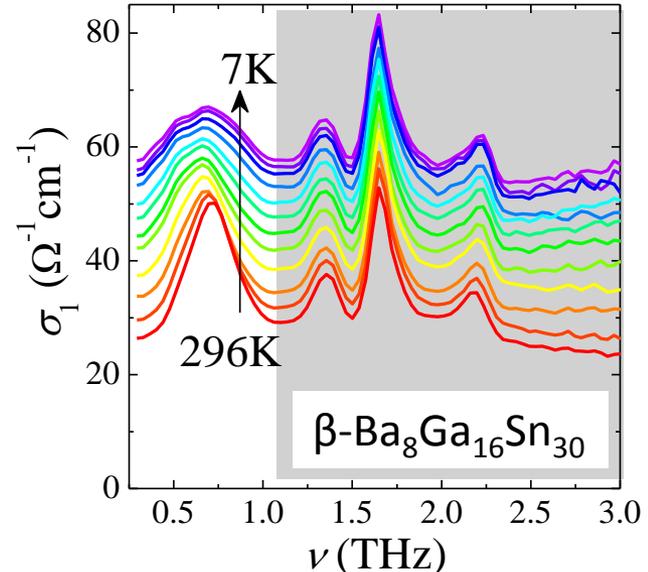
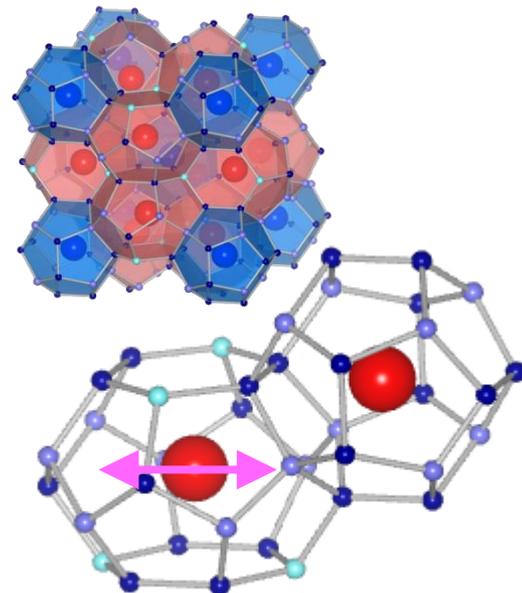


ボゾンピーク

ガラスの熱伝導率の振る舞いは、結晶とは全く異なり、かつ温度依存性が普遍的である。しかし、その振る舞いはガラスの物理の未解決問題の1つとして残されている。

ラットリングフォノン

とある熱電材料において、「ガラス的熱物性を単結晶にて発現している」、異常が発見された。



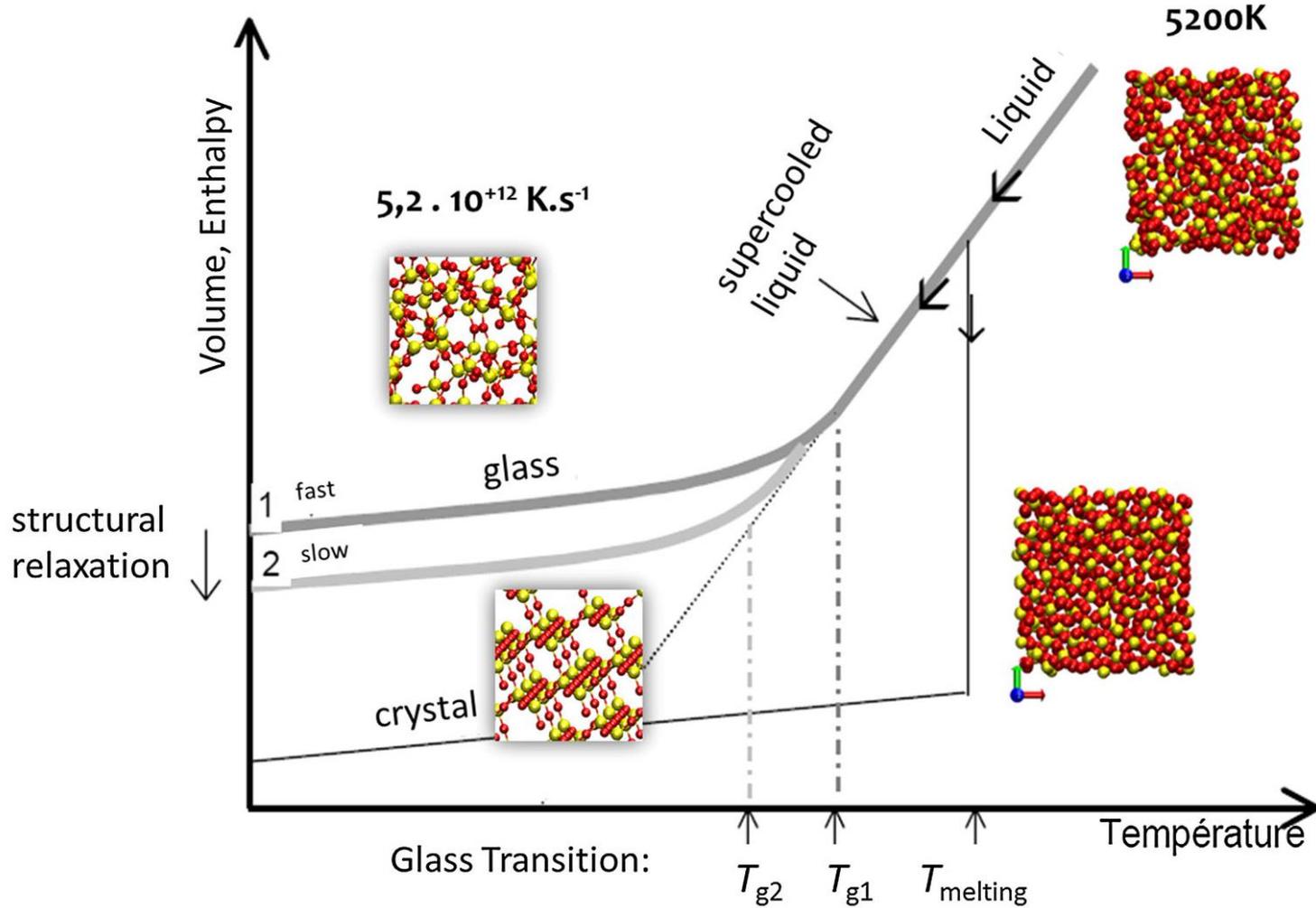
R. C. Zeller and R. O. Pohl, PRB **4**, 2029 (1971).
 T. Takabatake *et al.*, RMP **86**, 669 (2014).

T. Mori *et al.*, PRL **106**, 015501 (2011).

ガラスとは



11



A. Tanguy *et al.*, EPL **90**, 16004 (2010).

ガラスのTHz帯普遍的励起 ボゾンピーク



ガラスの物理の未解決問題:

- ・ガラス転移
- ・ボゾンピーク (boson peak, BP)

テラヘルツ帯の普遍的励起.

BPは $\frac{g(\nu)}{\nu^2}$ のスペクトルに現れる.

過剰なVDOS $g(\nu)$: 結晶のデバイモデルから外れた振る舞い.

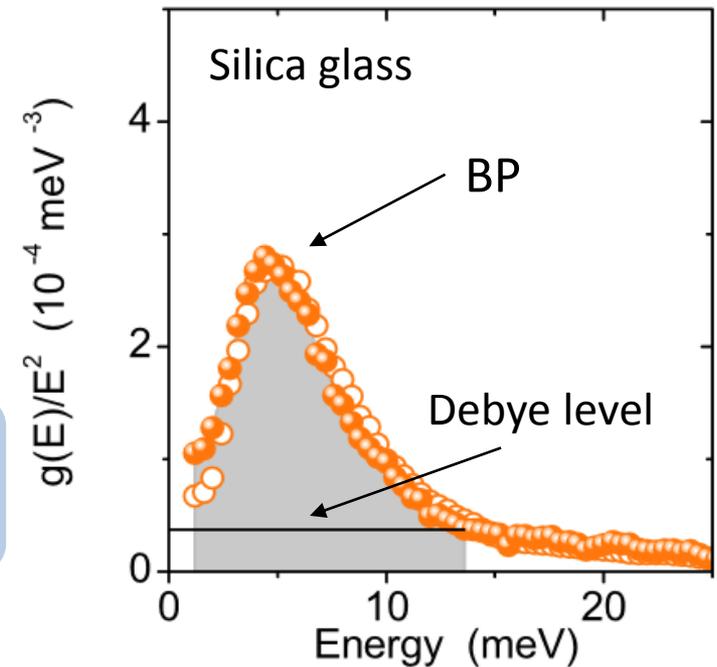
結晶

デバイモデル: $g(\omega) \propto \omega^2$ (3次元の場合),

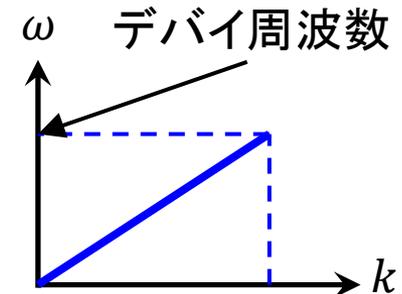
ここでは、音響フォノンが比例関係を持つと仮定している.

$$g_{Debye}(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v_D^3} \quad (v_D: \text{デバイ速度}, V: \text{体積})$$

$$1 \text{ THz} = 33.3 \text{ cm}^{-1} = 4.14 \text{ meV} = 48 \text{ K}$$



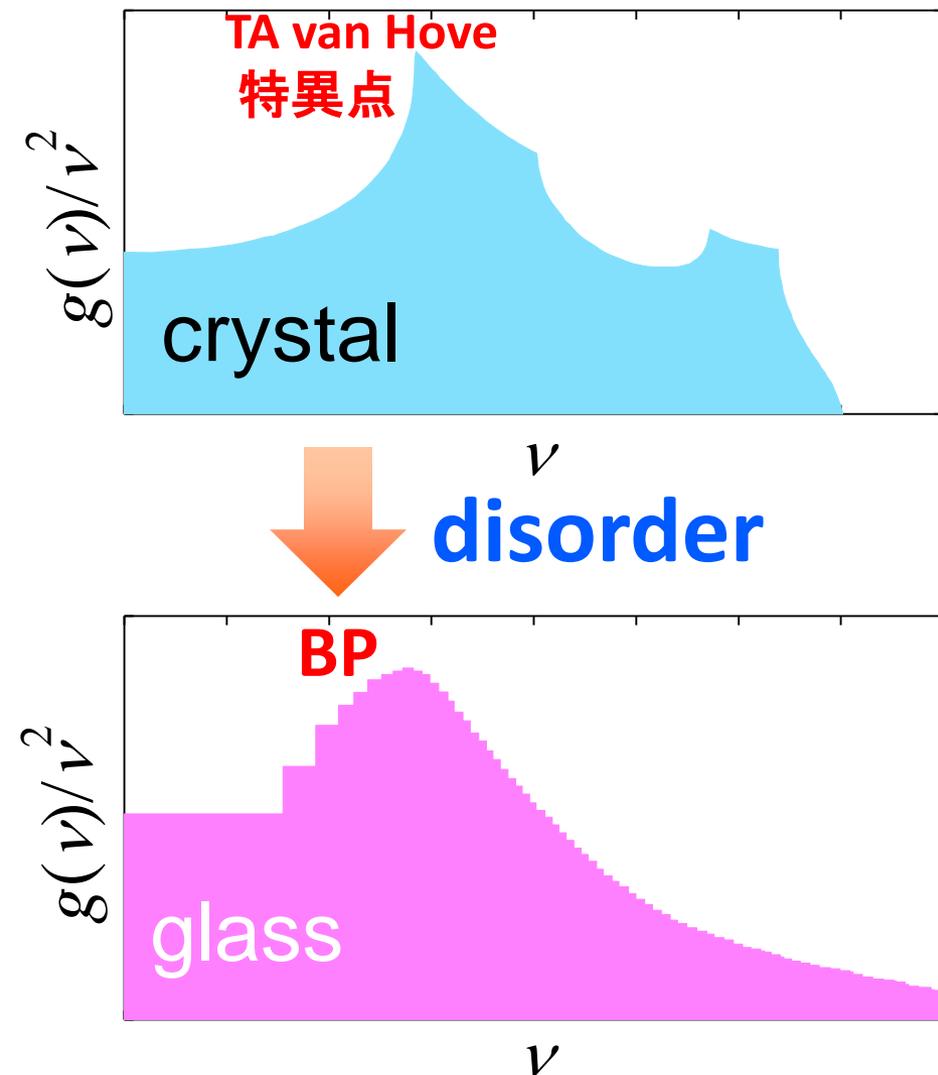
A. I. Chumakov *et al.* PRL 112, 025502 (2014).



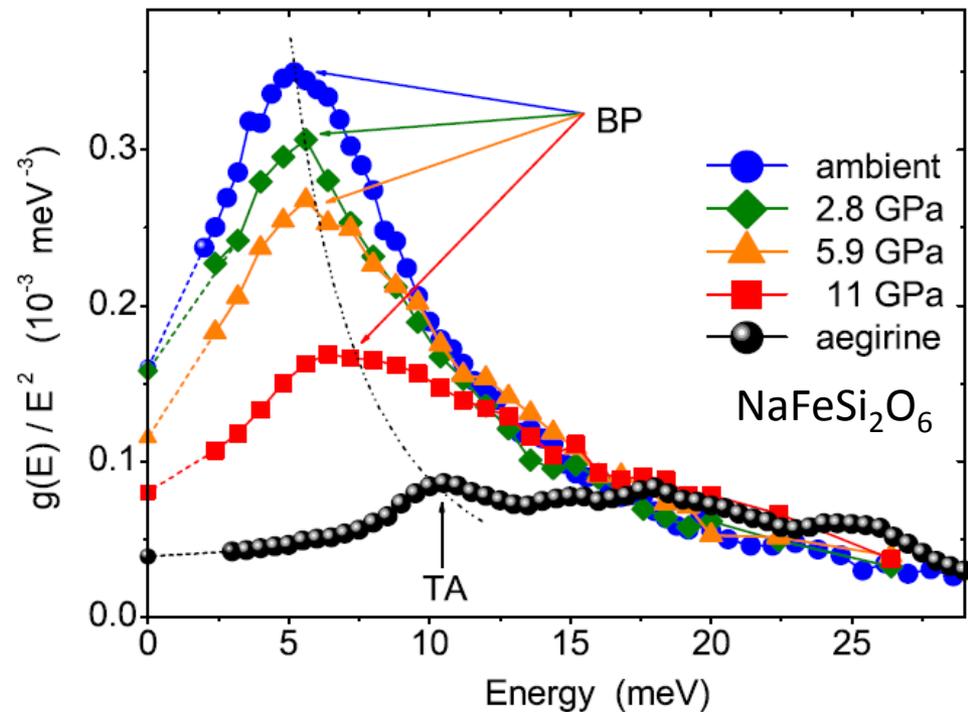
ボゾンピークの起源？



13



1 THz = 33.3 cm⁻¹ = 4.14 meV = 48 K

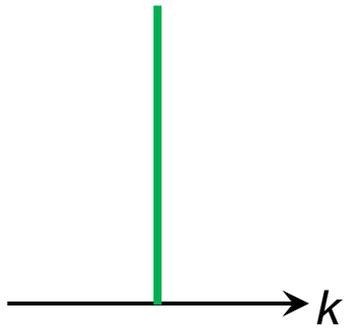
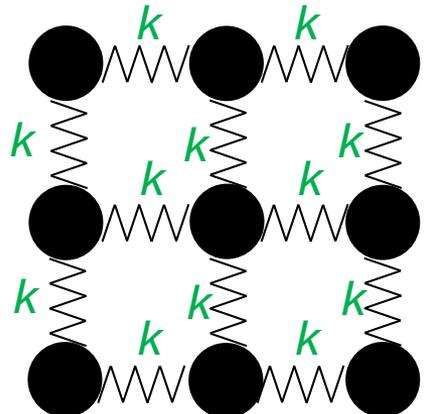


Naケイ酸塩ガラスのBPが対応する結晶のTA van Hove 特異点に変形していく...?

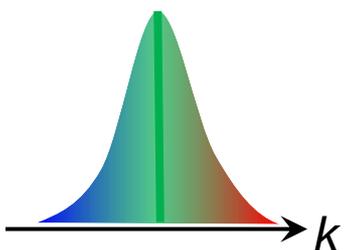
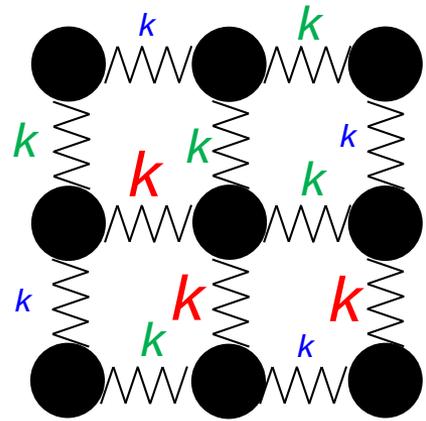
A. I. Chumakov *et al.*, PRL **106**, 225501 (2011).

Data are depicted from R. Zorn, Physics **4**, 44 (2011).

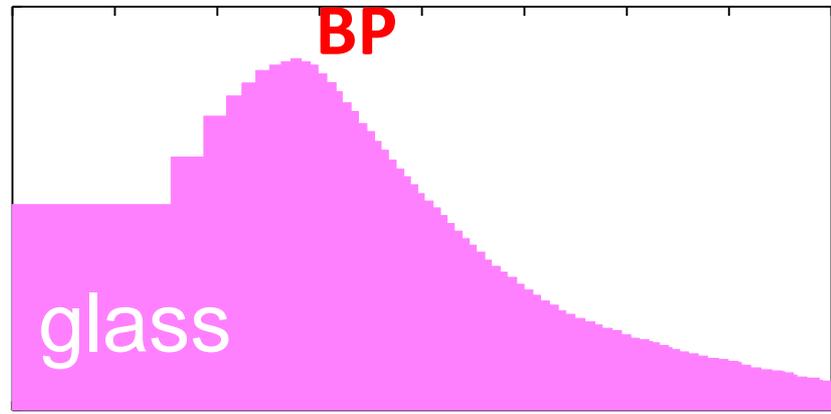
ボゾンピークの起源は？ 「音波の終わり」？



バネ定数に
乱雑さを持たせる。



disorder



Data are depicted from R. Zorn, *Physics* **4**, 44 (2011).

A. I. Chumakov *et al.*, *PRL* **106**, 225501 (2011).

ボゾンピークの理論家との出会い

15

Continuum limit of the vibrational properties of amorphous solids

Hideyuki Mizuno^{a,1}, Hayato Shiba^b, and Atsushi Ikeda^a



水野英如氏

PNAS
S
E
C
T
I
P
I
A



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



東北大学
TOHOKU UNIVERSITY

ガラスと通常の固体の本質的な違い:

—コンピュータシミュレーションによってガラスの特異な

1. 発表者:

水野 英如 (東京大学大学院総合文化研究科 助教)

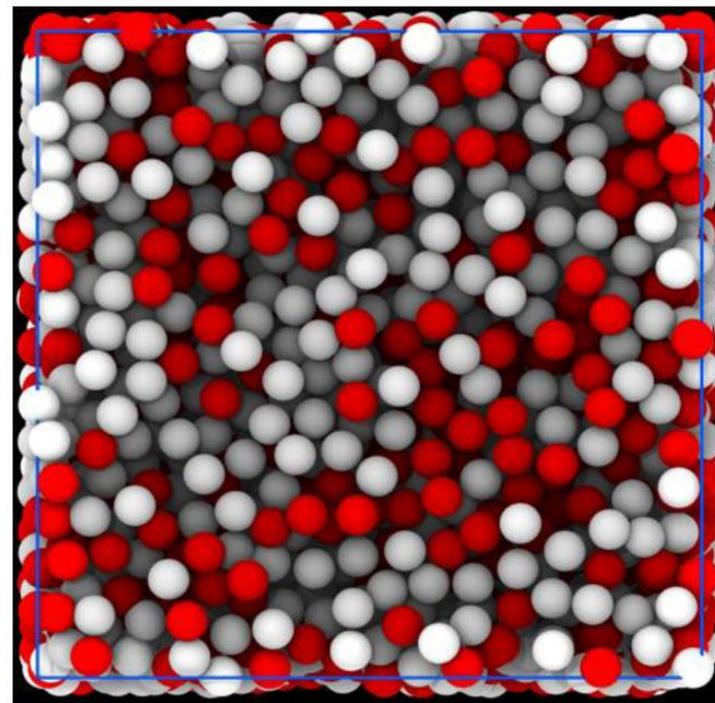
池田 昌司 (東京大学大学院総合文化研究科 准教授)

芝 隼人 (東北大学金属材料研究所 特任助教)

2. 発表のポイント:

◆ガラスに固有な分子振動のパターンを大規模コンピュータシミュレーションによって明らかにし、ガラスと通常の固体の振動特性が本質的に異なっていることを発見

◆固体に固有な分子振動は音波であり、音波はデバイ則と呼ばれる法則に従う。この常識に反し、ガラスには音波とは全く異なる局在振動があり、それが新しい法則に従うことを発見した。

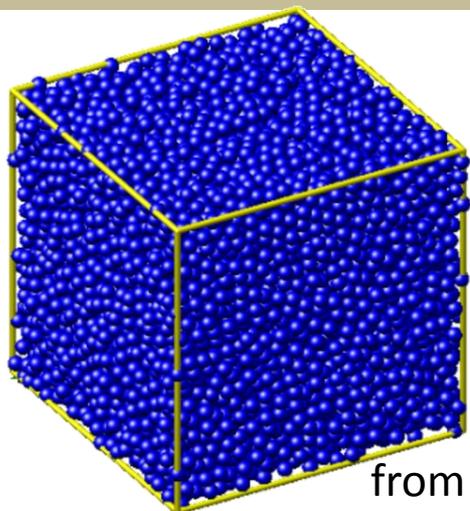


MD (分子動力学) シミュレーション

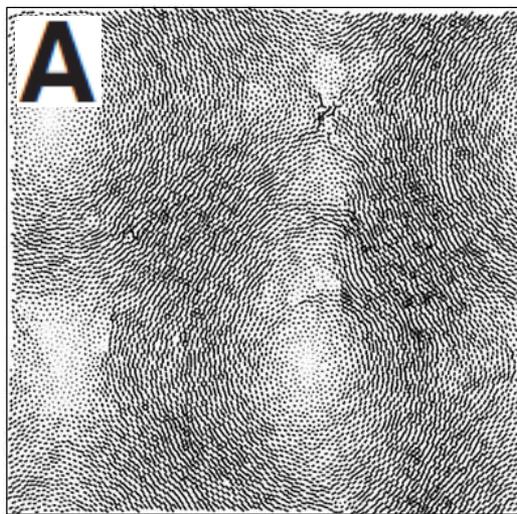
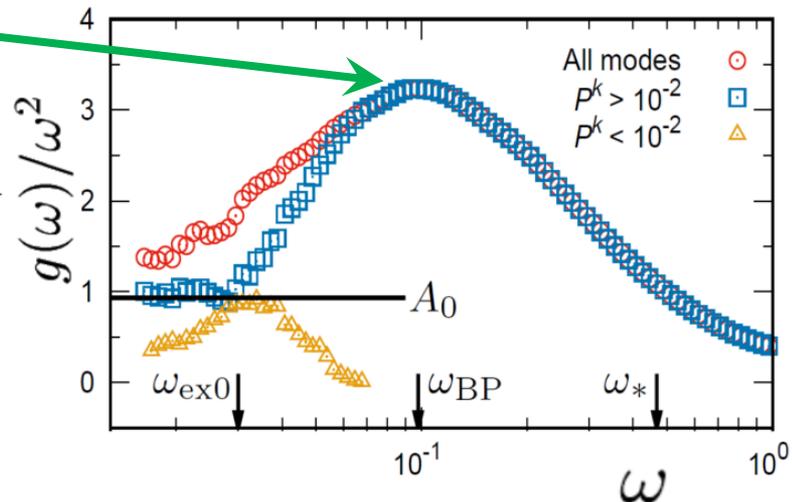
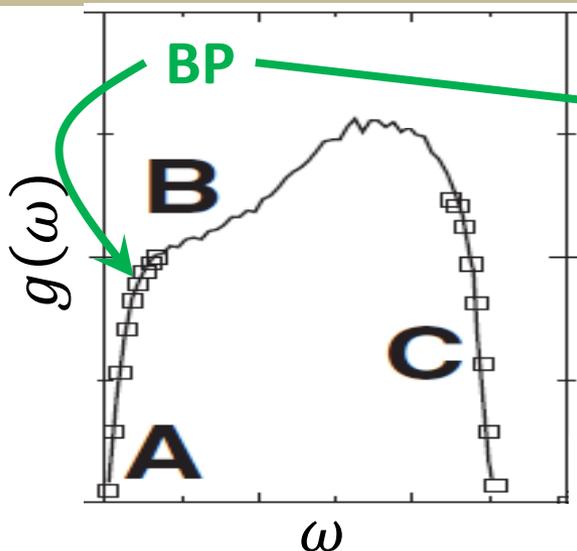
H. Mizuno et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 114, E9767 (2017).



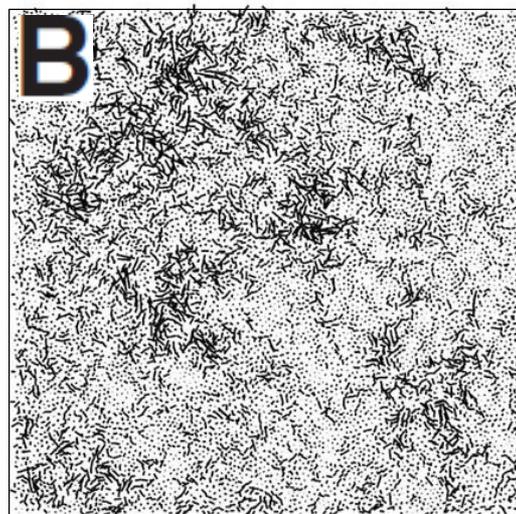
16



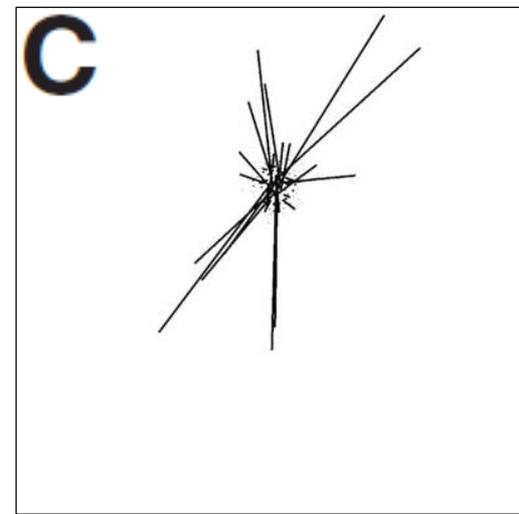
from
H. Mizuno



Plane-wave-like character



Filamentary extended mode



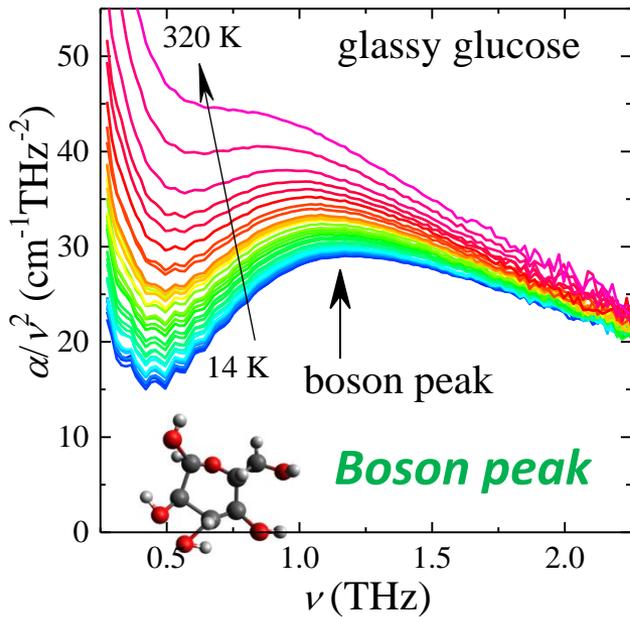
Highly localized mode

L. E. Silbert et al., PRE 79, 021308 (2009).

テラヘルツ分光で ガラスのボゾンピークを検出する



17



PHYSICAL REVIEW B **94**, 224204 (2016)

Boson peak dynamics of glassy glucose studied by integrated terahertz-band spectroscopy

Mikitoshi Kabeya,¹ Tatsuya Mori,^{1,*} Yasuhiro Fujii,² Akitoshi Koreeda,² Byoung Wan Lee,³ Jae-Hyeon Ko,³ and Seiji Kojima¹

¹Division of Materials Sciences, University of Tsukuba, 1-1-1 Tennodai, Tsukuba, Ibaraki 305-8573, Japan

²Department of Physical Sciences, Ritsumeikan University, 1-1-1 Noji-higashi, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

³Department of Physics, Hallym University, 1 Hallymdaehakgil, Chuncheon, Gangwondo 24252, Korea

(Received 7 October 2016; revised manuscript received 25 November 2016; published 21 December 2016)

We performed terahertz time-domain spectroscopy, low-frequency Raman scattering, and Brillouin light scattering on vitreous glucose to investigate the boson peak (BP) dynamics. In the spectra of $\alpha(\nu)/\nu^2$ [$\alpha(\nu)$ is the absorption coefficient], the BP is clearly observed around 1.1 THz. Correspondingly, the complex dielectric constant spectra show a universal resonancelike behavior only below the BP frequency. As an analytical scheme, we propose the relative light-vibration coupling coefficient (RCC), which is obtainable from the combination of the far-infrared and Raman spectra. The RCC reveals that the infrared light-vibration coupling coefficient $C_{\text{IR}}(\nu)$ of the vitreous glucose behaves linearly on frequency which deviates from Taraskin's model of $C_{\text{IR}}(\nu) = A + B\nu^2$ [S. N. Taraskin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 055504 (2006)]. The linearity of $C_{\text{IR}}(\nu)$ might require modification of the second term of the model. The measured transverse sound velocity shows an apparent discontinuity with the flattened mode observed in the inelastic neutron scattering study [N. Violini *et al.*, *Phys. Rev. B* **85**, 134204 (2012)] and suggests a coupling between the transverse acoustic and flattened modes.



報道関係者各位

テラヘルツ光でガラス^{注1)}の普遍的励起ボゾン
～ガラスの物理の未解決問題^{注3)}の

研究成果のポイント

- 身近な糖類であるグルコース(ブドウ糖)ガラスのボゾンピーク^{注4, 図1)}で検出することに成功しました。
- THz スペクトルとラマンスペクトルを用いた、BP の新しい評価^{注5)}で、ガラスの物理の未解決問題^{注3)}の



研究最先端

テラヘルツ分光で見るガラスのボゾンピーク

¹筑波大学 数理物質系 物質工学域, ²立命館大学 理工学部 物理科学科

森 龍也¹, 藤井 康裕², 小島 誠治¹

Boson peak dynamics investigated by terahertz spectroscopy

Tatsuya Mori¹, Yasuhiro Fujii², Seiji Kojima¹

¹Division of Materials Science, University of Tsukuba

²Department of Physical Sciences, Ritsumeikan University

新しい展開：フラクタルダイナミクス

18

フラクタル

一見ランダムに見えるが、拡大すると同じ形を繰り返すパターンが見られる図形。

マンデルブロ

「カリフラワーの房花の一つをカットすると、カリフラワー全体を小さくしたような形を見ることができます」

「それをさらにカットすると、切っても切っても小さなカリフラワーがあらわれます。世界にはこのような独特な性質をもつ図形、全体と同じ形で小さくしたような部分から成る図形が存在するのです」

自然界のフラクタル：

雲の輪郭の形状，リアス式海岸の海岸線，小腸の絨毛，レンガなどへ浸み込む水のパターン...

注：本ページの出典記載は割愛しています。

$$z_{n+1} = z_n^2 + c$$
$$z_0 = 0$$

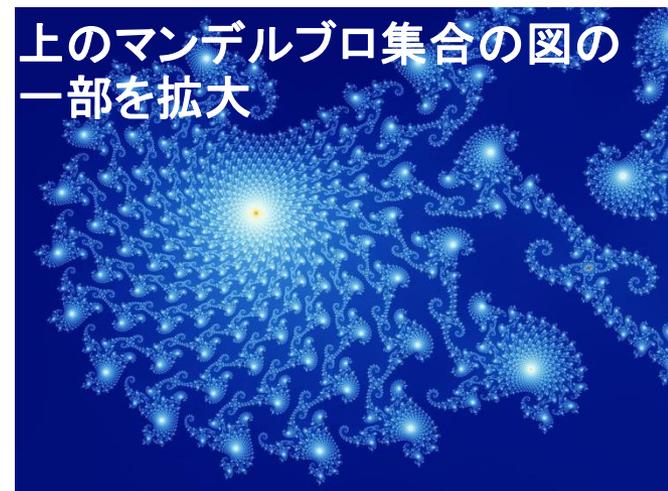
マンデルブロ集合

フラクタルという概念の生みの親
数学者ブノワ・マンデルブロ

Benoît B. Mandelbrot

1924年11月20日 - 2010年10月14日

上のマンデルブロ集合の図の一部を拡大



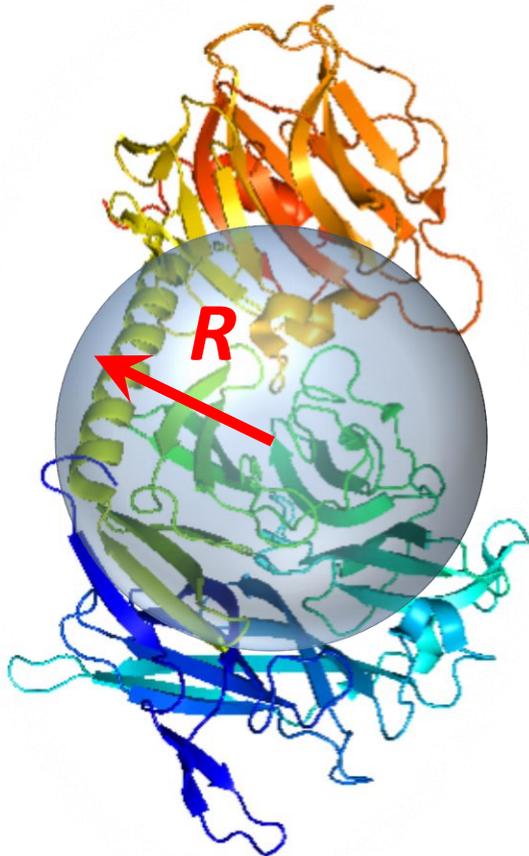
高分子ガラスの質量フラクタル

19

質量フラクタル

$$M \sim R^D$$

$$M \propto N_{\text{原子}} (\propto N_{\text{アミノ酸}})$$



半径 R の球内に含まれる質量 M は、 R の D 乗に比例する。
(結晶であれば、 $D=3$)

しかし、タンパク質の D (フラクタル次元と言う)は3からずれて、約2.5となる。

このことを、タンパク質は「質量フラクタル」を見せるという。

結晶という構造ならば、フォノン。
では、フラクタルという構造ならば、
どんなダイナミクス？

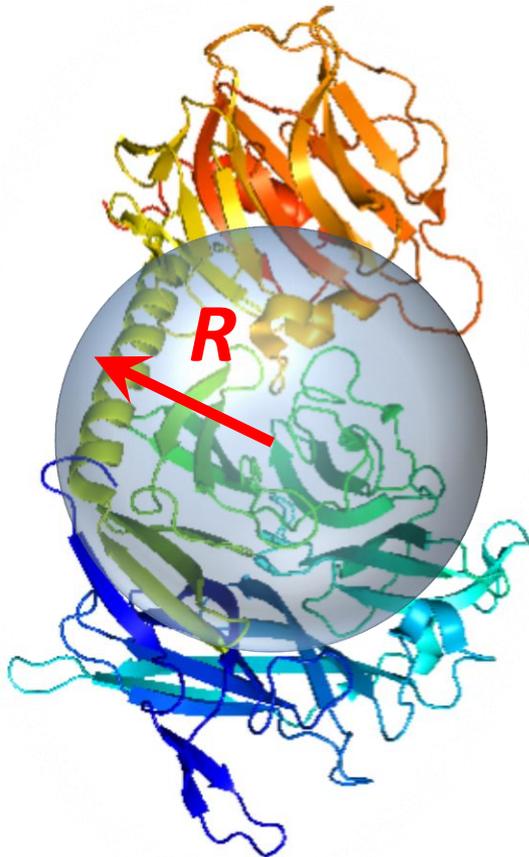
テラヘルツ分光で フラク톤を検出する

20

質量フラクタル

$$M \sim R^D$$

$$M \propto N_{\text{原子}} (\propto N_{\text{アミノ酸}})$$



「フラク톤」はテラヘルツ帯に現れるはず。
しかし、テラヘルツ分光(赤外)による研究はまだない。

テラヘルツ分光のスペクトルにどのようにフラク톤が現れるのか？
最近、その**結合定数の定式化に成功**
(<https://arxiv.org/abs/1910.04400>)。

$$C_{\text{IR}}(\nu) = A + B \omega^2 \frac{d_f}{D_f}$$

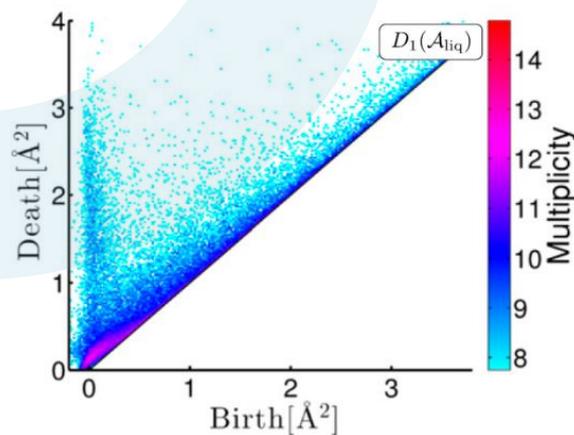
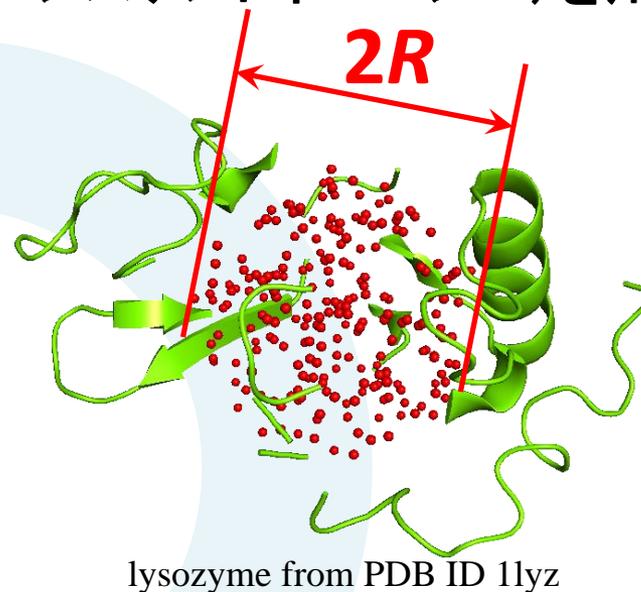
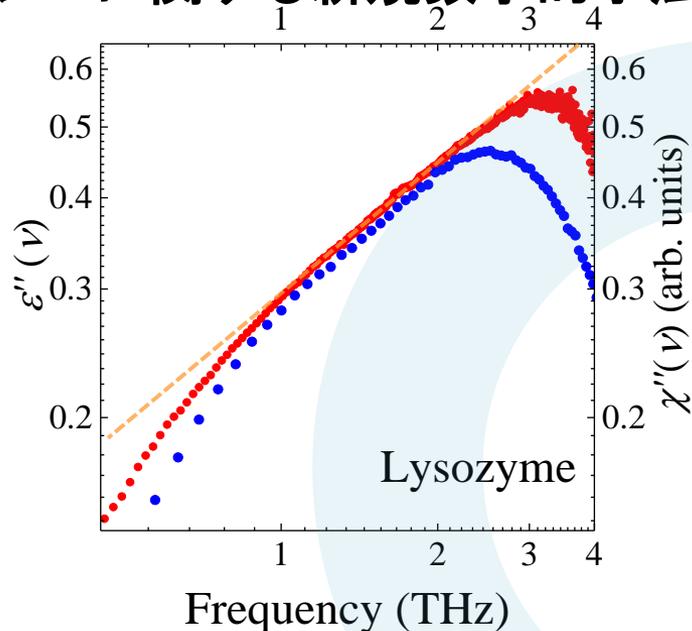
今回提案する赤外光振動結合定数の表式

フラクタル構造とフラクタルダイナミクスの研究 分光と数学



21

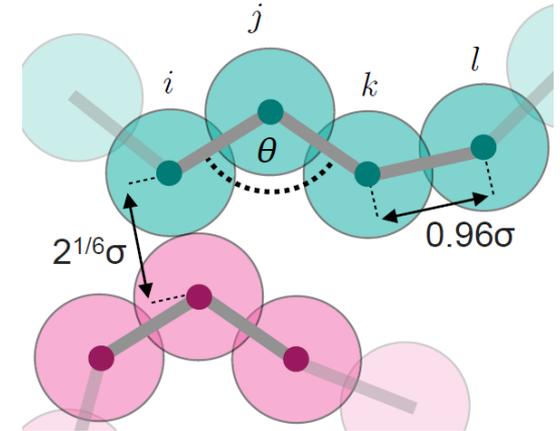
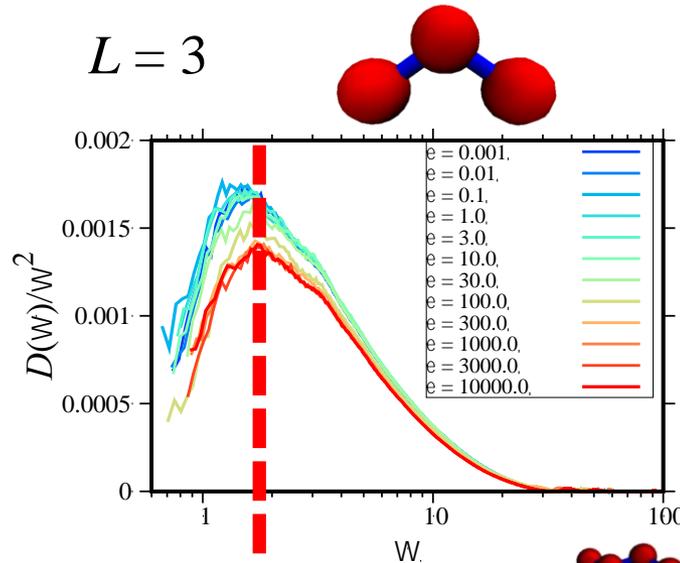
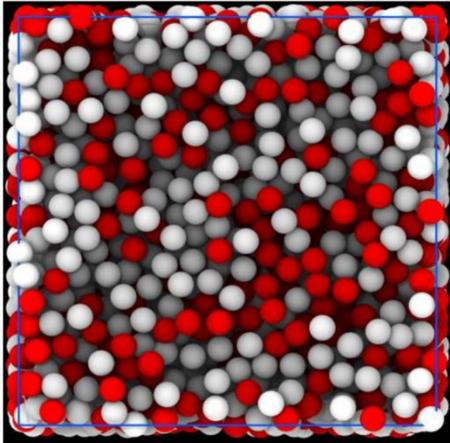
- ナノスケール自己相似性に由来するフラクタルの分光研究
- トポロジーに関する新規数学的手法(パーシステントホモロジー)を用いた研究



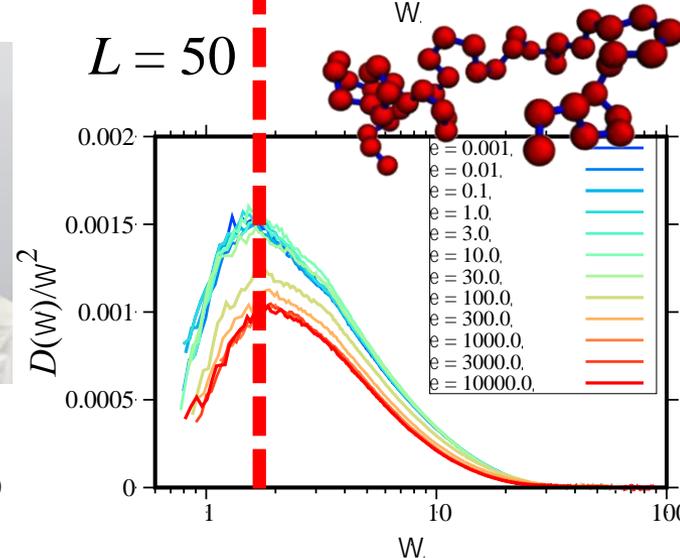
- ◆ THz光で“フラクタル”を検出できる
- ◆ そもそも、THz帯のフラクタルって何？
- ◆ トポロジーに関する数学(パーシステントホモロジー)のフラクタル構造体への応用

“Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of rigidity of chain bending”

N. Tomoshige, T.M. *et al.*, submitted to *Sci. Rep.* arXiv:1907.10899



R. Milkus *et al.*,
Macromol. **51**, 1559 (2018).



K. Kim
Osaka Univ.

H. Mizuno
Univ. of Tokyo

MDシミュレーション

- ボゾンピーク周波数は、鎖長に依らないことが明らかになった。
- フラク톤は現れるのか？

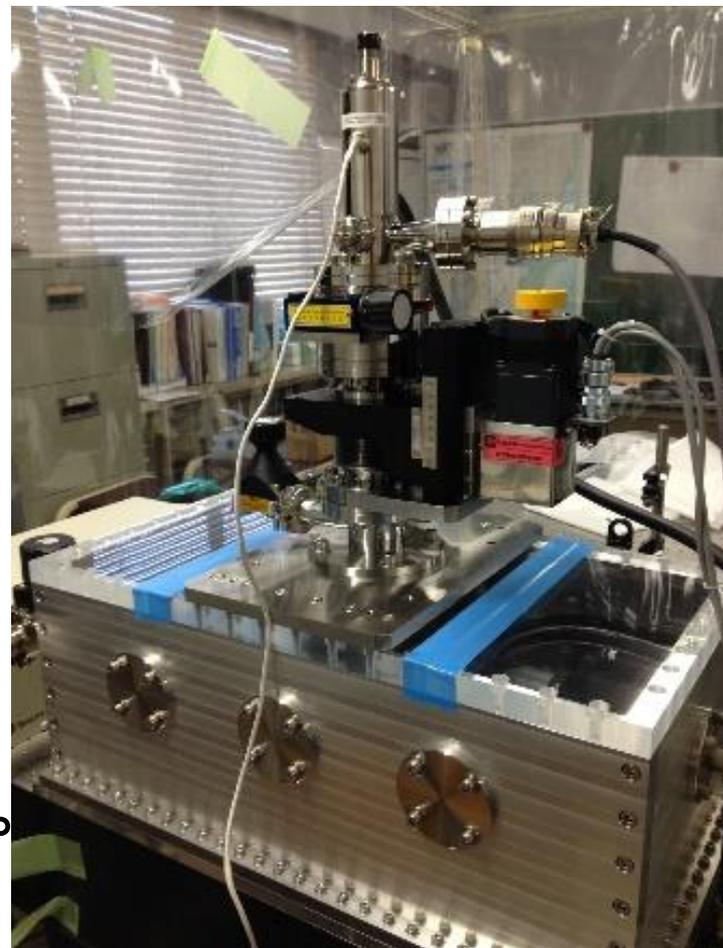
当研究室のTHz-TDSの特徴

- 極低温(約4K)～800Kまで連続温度変化が可能。
- 温度変化測定は全自動化されている(3日間ほど全自動測定が可能)。
- 高精度スペクトル取得の目的のため、遅延ステージやプログラムを改良済。

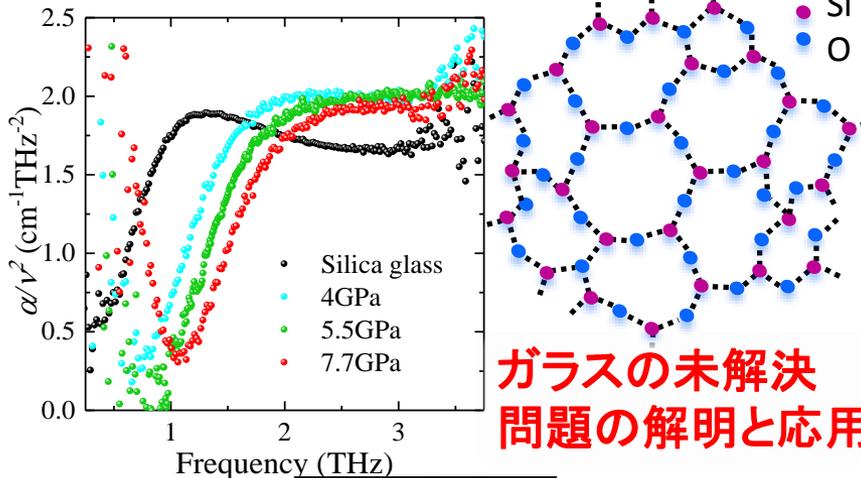
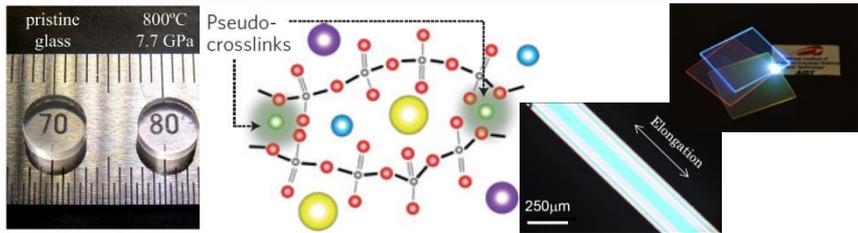
↓

今後の改良点

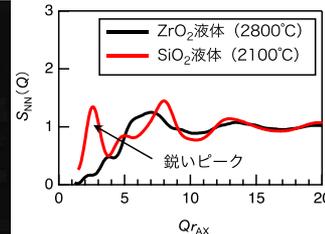
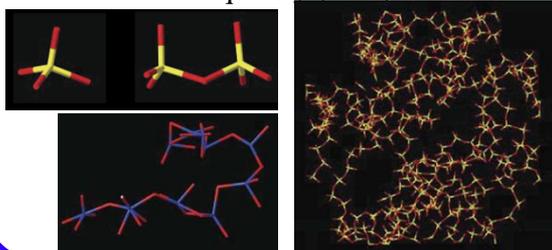
- 液体試料の極低温測定機構を構築中。
- 反射型THz-TDSを構築中。



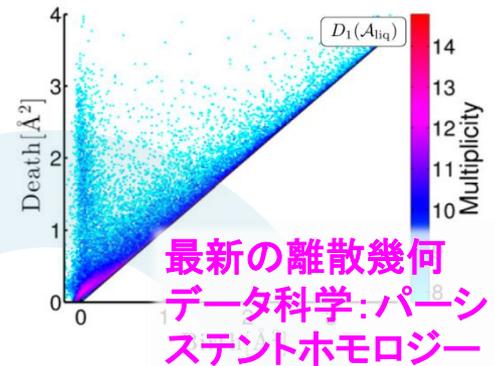
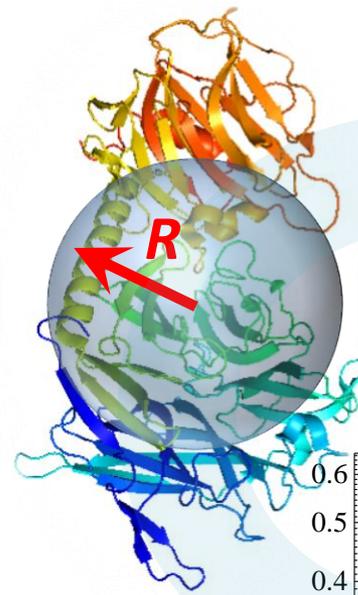
先端機能性ガラス材料の ボゾンピークダイナミクス



**ガラスの未解決
問題の解明と応用**



タンパク質及び高分子ガラスの フラクタルダイナミクス



最新の離散幾何
データ科学: パーシ
メントホモロジー

質量フラクタル
 $M \sim R^D$
によって
現れる普遍性

